

0-789904

*На правах рукописи*



Гриняев Сергей Николаевич

**ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫХ И  
ДЕФЕКТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ**

Специальность 01.04.10 – «Физика полупроводников»

**АВТОРЕФЕРАТ**

**диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук**

**Томск 2011**

Работа выполнена в ОСП «Сибирский физико-технический институт им. академика В.Д.Кузнецова Национального исследовательского Томского государственного университета» и на кафедре теоретической и экспериментальной физики ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»

Научный консультант: доктор физико-математических наук, профессор  
Караваев Геннадий Федорович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор  
Поплавной Анатолий Степанович

доктор физико-математических наук, профессор  
Хон Юрий Андреевич

доктор физико-математических наук, профессор  
Кишин Виктор Андреевич

Ведущая организация: Институт физики полупроводников СО РАН,  
г. Новосибирск.

Защита состоится 27 октября 2011 г. в 14 ч 30 мин. на заседании диссертационного  
совета Д 212.267.07 в ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский  
государственный университет» по адресу: 634050, г.Томск, пр.Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке ФГБОУ ВПО  
«Национальный исследовательский Томский государственный университет» по  
адресу: 634050, г.Томск, пр.Ленина, 34а.

Автореферат разослан 27 сентября 2011 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 212.267.07,  
доктор физико-математических наук

НАУЧНАЯ БИБЛИОТЕКА КГУ



0000687488

И.В.Ивонин



## Общая характеристика работы

**Актуальность работы.** Успехи современной электроники и перспективы ее дальнейшего развития в значительной степени связаны с использованием полупроводниковых квантово-размерных структур (квантовых ям, проволок, точек, сверхрешеток и т.д.), обладающих широким набором электрофизических параметров в актуальном диапазоне спектра. Их применение позволяет совершенствовать потребительские свойства электронных приборов, открывает возможности для создания устройств нового поколения - квантовых компьютеров, сверхчувствительных датчиков, нанороботов и т.д. [1].

Разработка нанотехнологий невозможна без понимания природы процессов, протекающих в объеме и на границах раздела материалов. Это стимулирует обширные исследования, посвященные установлению взаимосвязи электронных свойств с составом и строением твердых тел, развитию теоретических методов и физических моделей для расчета и качественного анализа электронных и колебательных спектров низкоразмерных структур.

Свойства полупроводниковых наноматериалов сильно отличаются от свойств объемных материалов, носят существенно квантовый характер и могут быть адекватно описаны лишь с применением современных методов исследования, фундаментом которых выступает метод функционала электронной плотности DFT. На основе метода DFT разработаны программы, позволяющие определять свойства кристаллов с различным химическим составом и строением. Особенно эффективно их применение к структурам, в элементарной ячейке которых находится сравнительно небольшое число атомов ( $< 100$ ) [2]. В тоже время активные области наноматериалов зачастую содержат многие сотни и тысячи атомов, что делает использование *ab-initio* методов крайне трудоемким, несмотря на прогресс компьютерной техники и развитие параллельных вычислений.

К исследованию полупроводниковых наноструктур привлекаются полуэмпирические методы (метод сильной связи, *kp*-метод, метод эффективной массы и т.п.), которые дают более наглядное описание с учетом основных электронных процессов. Недостатком полуэмпирических методов является то, что их параметры определяются из экспериментальных данных, которые зачастую неполны и неоднозначны, а используемые упрощения сужают область применения ограниченным энергетическим интервалом и частными случаями внешних воздействий.

В связи с этим получили развитие методы, в которых стремятся соединить достоинства полуэмпирических (сравнительно простых в реализации и опирающихся на хорошо установленные данные) и *ab-initio* (предсказывающих свойства мало изученных материалов без привлечения эмпирической информации) подходов. Одним из наиболее эффективных является метод модельного псевдопотенциала, обеспечивающий высокую точность описания электронного спектра. В практических расчетах преимущество имеют псевдопотенциалы с мягкой сердцевиной, позволяющие использовать не большой базис из плоских волн, что дает возможность исследовать сложные структуры с большим числом атомов в элементарной ячейке. Примером являются псевдопотенциалы [3], параметры которых определялись из экспериментальных данных и анализа результатов *ab-initio* расчетов бинарных кристаллов GaAs и AlAs. Псевдопотенциалы [3] применялись для расчета электронных состояний квантовых ям, проволок, точек. Они обеспечивают описание электронного спектра наноструктур, содержащих  $\sim 500000$  атомов в элементарной ячейке, с точностью  $\sim 0.1$  эВ, что пока не достижимо для прямых *ab-initio* расчетов. Определение подобных псевдопотенциалов из обширной базы данных является трудоемкой задачей. В работе [3] они найдены для трех атомов (Ga, Al, As) и могут использоваться лишь в структурах, состоящих из этих атомов. Потребность в описании других, многообразных наноструктур требует развития новых методов, применение



чувствительных фотоприемников и излучателей ближнего и среднего ИК - диапазонов, многофункциональных элементов оптической электроники [6,7]. Однако присущее постростовым кристаллам значительное поглощение в области прозрачности ( $0.65 \div 13$ ) мкм и особенно в области лазерной накачки ( $0.65 \div 3$ ) мкм ограничивает его практическое использование. Выяснению природы "аномального" поглощения света в  $\text{ZnGeP}_2$  посвящены многочисленные исследования. Большинство из них связывают это поглощение с высокой дефектностью материала. Многообразие источников нежелательного ИК поглощения требует выяснения их индивидуальной роли в спектрах поглощения.

### **Цели и задачи работы**

Целью работы является развитие теории электронных, фононных состояний и расчет параметров электрон-фононного взаимодействия в квантоворазмерных полупроводниковых структурах, систематическое исследование свойств дефектных полупроводников, выявление закономерностей и построение моделей физических процессов.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Исследование роли плавного интерфейсного потенциала в процессах туннелирования электронов в гетероструктурах  $\text{GaAs}/\text{AlAs}$  с границами (001), (111), а так же в электронных состояниях сверхрешеток  $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$  и квантовых точек.
2. Изучение электронных состояний квантовых точек  $\text{Ge}/\text{Si}$ ,  $\text{Ga}/\text{GaAs}$ ,  $\text{As}/\text{GaAs}$  в зависимости от их размеров. Анализ оптических свойств квантовых точек  $\text{Ge}/\text{Si}$ ,  $\text{w-GaN}/\text{AlN}$  и формирования барьера Шоттки в полупроводниках с металлическими квантовыми точками и слоями.
3. Расчет глубоких уровней и интерпретация оптических спектров бинарных и тройных соединений с одиночными и кластерными дефектами.
4. Анализ закономерностей в поведении глубоких уровней собственных дефектов в группе кристаллов  $\text{A}_3\text{B}_5$ , развитие модели закрепления уровня Ферми в облученных материалах.
5. Изучение междолинного рассеяния электронов на коротковолновых фононах в сверхрешетках  $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$  с тонкими слоями.
6. Исследование влияния внутренних электрических полей на рассеяние электронов в напряженных нитридных структурах  $\text{w-GaN}/\text{AlN}(0001)$ .

### **Научная новизна работы**

- 1) Впервые исследовано влияние плавного интерфейсного потенциала на электронные состояния сверхрешеток  $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$  и процессы туннелирования электронов в структурах  $\text{GaAs}/\text{AlAs}$  с границами (001) и (111).
- 2) Проведено систематическое исследование собственных дефектов в группе соединений  $\text{A}_3\text{B}_5$ , установлены закономерности в изменении глубоких уровней, определены условия стабилизации уровня Ферми в облученных полупроводниках, развита модель, позволяющая прогнозировать свойства дефектных полупроводников.
- 3) Исследованы глубокие уровни точечных и сложных собственных дефектов в соединении  $\text{ZnGeP}_2$ , проведена интерпретация особенностей спектров поглощения дефектного материала.
- 4) Исследованы электронные состояния кластеров из атомов мышьяка и галлия в арсениде галлия, установлен характер состояний, вызывающих закрепление уровня Ферми в материале  $\text{Ga}/\text{GaAs}$ .
- 5) Изучены закономерности междолинного рассеяния электронов на фононах в ряду сверхрешеток  $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$  и соответствующих им твердых растворов. Определены междолинные деформационные потенциалы для всех каналов рассеяния в

нижних зонах проводимости сверхрешеток. Проведен анализ квантоворазмерных эффектов в электронных, фононных состояниях и деформационных потенциалах.

6) Исследованы электронные состояния и оптические свойства пирамидальных квантовых точек  $w\text{-GaN/AlN}(0001)$ . Показана возможность усиления интенсивности излучения при уменьшении размеров квантовых точек.

**Практическая значимость работы** заключается в том, что она дает рекомендации для уменьшения нежелательного инфракрасного поглощения света соединением  $\text{ZnGeP}_2$ , позволяет предсказывать свойства облученных материалов, предсказывает повышение эффективности фотоприемников на основе малых квантовых точек  $w\text{-AlN/GaN}(0001)$ . Определенные параметры электронного спектра и электрон-фононного взаимодействия позволяют прогнозировать свойства наиболее перспективных материалов в приборах с горячими электронами.

**На защиту выносятся следующие положения :**

1) Состояния глубоких уровней вакансий Al, Ga и As в сверхрешетке  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1(001)$  зависят от положения дефектов. Понижение симметрии сверхрешеток по сравнению с бинарными кристаллами приводит к частичному снятию вырождения глубоких уровней вакансий, находящихся в средних (крайних) по отношению к Al слоях, и различной ориентации электронных плотностей, вызывающей поляризационную зависимость поглощения с участием глубоких уровней, что может быть использовано для анализа геометрического распределения вакансий. Наибольшие изменения ( $\sim 0.1$  эВ) имеют место для состояний вакансии As, расположенной на гетерогранице.

2) В арсениде галлия с кластерами из атомов галлия с ростом размеров кластеров уровень Ферми быстро достигает своего предельного значения  $F_{im}=0.6$  эВ, близкого к величине барьера Шоттки для плоской границы металл/полупроводник. Положение по энергии и "хвосты" металл-индуцированных состояний в окрестности уровня Ферми определяются интерфейсными слоями из антиструктурных дефектов GaAs.

3) В кремнии с германиевыми кластерами дырочный уровень размерного квантования с ростом размеров кластеров монотонно смещается вглубь запрещенной зоны Si, вызывая красный сдвиг края оптического поглощения. Наиболее интенсивное поглощение связано с непрямыми в прямом и обратном пространствах электронными переходами с резонансного интерфейсного состояния на дно зоны проводимости кремниевой матрицы.

4) В малых пирамидальных квантовых точках  $w\text{-GaN/AlN}(0001)$  эффекты размерного квантования приводят к интенсивному поглощению света, поляризованного в базальной плоскости  $E \perp c$ . Оно связано с электронными переходами в зоне проводимости с нижнего уровня  $\Gamma_1$  на два близких уровня  $\Gamma_3$ , возникающих в результате смешивания зонных состояний  $\underline{C}$  долин и линии  $\Sigma$  бинарных кристаллов.

5) Полное отражение электронов от гетерограницы  $\text{GaAs/AlAs}(001)$  в интервале энергии между  $X$  - долинами AlAs и GaAs обусловлено взаимной компенсацией вкладов от „виртуальных процессов" с участием  $\Gamma$ ,  $X_1$  и  $X_3$  состояний. В среде, из которой электрон налетает на границу, из падающей и отраженной волн формируется стоячая волна. Появление нуля в коэффициенте прохождения не связано с каким-либо интерфейсным резонансным состоянием, а является следствием многодолинного характера зонного спектра GaAs, AlAs.

6) В несимметричных двухбарьерных структурах  $w\text{-GaN/Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{N}(0001)$  внутренние электрические поля, вызванные спонтанной и пьезоэлектрической поляризацией, приводят к красному или голубому сдвигу резонансных энергий в зависимости от толщины и расположения барьеров по отношению к полярной оси. В сверхрешетках  $(\text{GaN})_n(\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{N})_m$  внутренние поля формируют штарковскую лестницу электронных состояний при небольшом числе ультратонких слоев в отсутствии внешнего поля.

7) Сверхрешеточная модель интерфейсного потенциала в гетероструктурах, в которой междолинное смешивание происходит не на одной границе, как в стандартной модели с резким на границе потенциалом, а на двух границах и в области переходного слоя. В структурах GaAs/AlAs учет плавного потенциала приводит к наиболее существенным изменениям при туннелировании электронов с участием коротковолновых состояний в области междолинного  $\Gamma$ - $X$  смешивания для границы (001) и  $\Gamma$ - $L$  смешивания для границы (111). Плавный интерфейсный потенциал вызывает уменьшение междолинного смешивания на гетерограницах, приводит к заужению Фано-резонансов, исчезновению интерфейсных состояний на одной границе, сдвигам нижних резонансов.

8) В сверхрешетках  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ ,  $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ ,  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3(001)$  эффекты размерного квантования приводят к росту интенсивности междолинных переходов по сравнению с аналогичными переходами в твердых растворах. Сильная локализация волновых функций в глубоких  $\Gamma$  ямах GaAs вызывает немонотонное изменение деформационных потенциалов переходов типа  $\Gamma$ - $X$  и  $\Gamma$ - $L$  в этом ряду сверхрешеток. Междолинные переходы электронов в зоне проводимости сверхрешеток  $\Gamma_1$ - $M_5$ ,  $\Gamma_1$ - $X_1$ ,  $\Gamma_1$ - $X_3$ ,  $X_1$ - $X_1$ ,  $X_1$ - $X_3$ ,  $\Gamma_3$ - $M_5$  происходят в основном за счет колебаний катионов, переходы  $X_1$ - $M_5$ ,  $X_3$ - $M_5$ ,  $\Gamma_3$ - $X_1$ ,  $\Gamma_3$ - $X_3$  – за счет колебаний анионов, а наиболее интенсивные каналы рассеяния  $\Gamma_3$ - $M_5$  и  $Z_3$ - $M_5$  связаны с оптическими колебаниями легких атомов Al.

9) Глубокий уровень наиболее локализованного дефектного состояния наименьшим образом зависит от химического строения кристалла, в котором находится дефект. В группе соединений  $\text{A}_3\text{B}_5$  такой уровень имеет среднюю энергию  $\langle E_{\text{B}}^{\text{abs}} \rangle = 4.63$  эВ (ниже уровня вакуума) с небольшой дисперсией 0.08 эВ, благодаря чему он играет роль уровня Ферми в облученных, сильно дефектных полупроводниках.

**Личный вклад автора** диссертации состоит в постановке задач, разработке методов, выполнении расчетов и их анализе. В работах, опубликованных с соавторами, участие автора было определяющим в той части результатов, которые сформулированы в защищаемых положениях и выводах.

**Достоверность полученных результатов** обусловлена использованием апробированных и хорошо зарекомендовавших себя методов псевдопотенциала и функционала электронной плотности. Полученные результаты находятся в качественном и количественном согласии с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными. Сформулированные выводы являются взаимно согласованными и не содержат внутренних противоречий.

### **Апробация работы**

Основные результаты работы докладывались на 11-th Conference on "Radiation Physics and Chemistry of Condensed Matter" (Томск, 2000 г.), Всероссийской конференции "Нитриды галлия, индия и алюминия – структуры и приборы" (Москва, 2001 г.), Congress of Material Research Society (Santa-Barbara, USA, 2001), 8-й Международной конференции "Физико-химические процессы в неорганических материалах" (Кемерово, 2001 г.), Международной конференции "Оптика, оптоэлектроника и технологии" (Ульяновск, 2001 г.), VIII Российской конференции "Арсенид галлия и полупроводниковые соединения группы III-V" (Томск, 2002 г.), International Symposium "Ternary Chalcopyrite Semiconductors" (Paris, France, 2002), Международной конференции "Оптика, оптоэлектроника и технология" (Ульяновск, 2002 г.), VI Российской конференции по физике полупроводников (Санкт-Петербург, 2003 г.), X APAM Topical Seminar and III Conference "Materials of Siberia" "Nanoscience and technology" (Novosibirsk, 2003), Совещании "Актуальные проблемы полупроводниковой фотоники. Фотоника – 2003" (Новосибирск, 2003 г.), 12-th International Conference on radiation Physics and Chemistry of inorganic materials (Tomsk,

2003), Международной конференции “Современные проблемы физики и высокие технологии” (Томск, 2003 г.), Совещании “Кремний 2004” (Иркутск, 2004 г.), Международной конференции “Физико-химические процессы в неорганических материалах” (Кемерово, 2004 г.), 4-й Всероссийской конференции “Нитриды галлия, индия и алюминия – структуры и приборы” (Санкт-Петербург, 2005 г.), IX-ой конференции “GaAs и полупроводниковые соединения группы III-V” (Томск, 2006 г.), VIII международной конференции “Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы” (Ульяновск, 2006 г.), 15-th International Symposium “Nanostructures: physics and technology” (Новосибирск, 2007 г.), 5-ой Всероссийской конференции “Нитриды галлия, индия и алюминия: структуры и применения” (Москва, 2007 г.), IEEE International Siberian Conference on control and communications SiBCON-2007 (Toms, 2007), 6-ой Всероссийской конференции “Нитриды галлия, индия и алюминия: структуры и приборы” (Санкт-Петербург, 2008 г.), IX Российской конференции по физике полупроводников (Новосибирск – Томск, 2009 г.), 18-th International Symposium “Nanostructures: physics and technology” (Санкт-Петербург, 2010 г.), Четвертой Всероссийской конференции по наноматериалам (Москва, 2011 г.), 8-ой Всероссийской конференции “Нитриды галлия, индия и алюминия: структуры и приборы” (Санкт-Петербург, 2011 г.), а также обсуждались на научных семинарах в Сибирском физико-техническом институте при Томском госуниверситете.

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 47 научных статей в реферируемых журналах. Список публикаций приведен в конце автореферата.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения с выводами и списком основных результатов, списка литературы. Общий объем диссертации 412 страниц, в том числе 57 таблиц, 183 рисунка, список литературы включает 431 наименование.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обоснована актуальность темы, сформулированы цели и основные задачи исследования, отмечена научная новизна и практическая значимость результатов работы, сформулированы научные положения, выносимые на защиту.

**В первой главе** дается краткое описание методов расчета электронных состояний и физических свойств кристаллов и наноструктур. В работе использованы первопринципные псевдопотенциалы [8] и модельные псевдопотенциалы [3,9]. Модельные псевдопотенциалы ионов [9] представлены в виде суммы локального псевдопотенциала, нелокальных поправок от  $d$ -состояний остова и оператора спин-орбитального взаимодействия. Дополнительно, для учета энергетической зависимости и анизотропии псевдопотенциала в операторе кинетической энергии производилась перенормировка массы электрона. Потенциал валентных электронов учитывался путем экранировки ионных псевдопотенциалов функцией диэлектрической проницаемости. Параметры модельного псевдопотенциала определены из экспериментальных и теоретических данных группы алмазоподобных соединений по оптическим и фотоэмиссионным спектрам, эффективным массам и деформационным потенциалам, а также спектрам изолированных ионов и разрывам зон в гетероструктурах. Описаны методы расчета интегральных характеристик зонного спектра, комплексной зонной структуры, матрицы рассеяния.

**Во второй главе** обсуждаются результаты расчета зонного спектра кристаллов со структурами цинковой обманки и вюртцита, гексагональной  $h$ -BN и ромбоэдрической  $r$ -BN модификаций нитрида бора, тройных соединений со структурой халькопирита, сверхрешеток. Приведены результаты расчета фононного спектра кристаллов GaAs, AlAs



и ультратонких сверхрешеток  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$ ,  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ ,  $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ ,  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3(001)$ .

**Зонная структура  $\text{ZnGeP}_2$ .** Вычисленная зонная структура  $\text{ZnGeP}_2$  приведена на рис.1. Для сравнения показан спектр бинарного аналога GaP. Зона проводимости  $\text{ZnGeP}_2$  обладает сложным многодолинным характером.

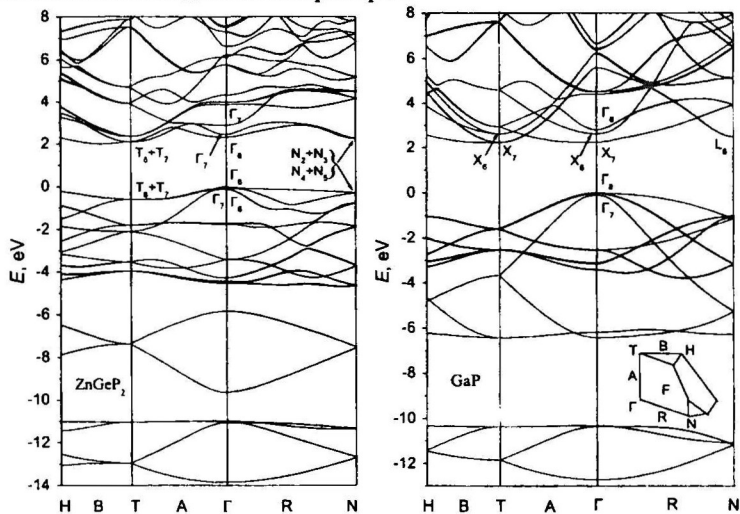


Рис.1. Зонные спектры  $\text{ZnGeP}_2$  и GaP.

Дно зоны проводимости расположено на линии  $B$  зоны Бриллюэна на расстоянии  $\sim 0.4$  ее длины от точки  $T$ , энергия не прямой запрещенной зоны равна 2.01 эВ. Состояния в экстремуме линии  $B$  происходят из сфералитных состояний линии  $\Delta$  гипотетического твердого раствора  $(\text{Zn}+\text{Ge})/2\text{P}$  со структурой цинковой обманки. В GaP вдоль такой линии около точки  $X$  существует двугорбая структура, экстремум которой расположен на 0.002 эВ ниже уровня  $X_3$ . Минимум зоны проводимости на линии  $B$  в тройном соединении непосредственно связан с этой структурой. Второй по энергии экстремум зоны проводимости  $\text{ZnGeP}_2$  расположен в точке  $T$  и имеет симметрию  $T_6+T_7$ . Состояние экстремума происходит из двух сфералитных состояний  $X_3(x)$  и  $X_3(y)$  и имеет энергию 2.11 эВ. Следующая долина находится около точки  $N$ , ее экстремум смещен вдоль линии  $R$ . Состояние в точке  $N$  связано со сфералитным состоянием  $L_1$  и имеет энергию 2.25 эВ. Экстремумы долин в точке  $\Gamma$  расположены в последовательности  $\Gamma_6(\Gamma_3)$ ,  $\Gamma_7(\Gamma_1)$ ,  $\Gamma_7(\Gamma_2)$  и происходят из сфералитных состояний  $X_7(X_3(z))$ ,  $\Gamma_6(\Gamma_1)$  и  $X_6(X_1(z))$  соответственно. Расчет методом LDA [10] дает обратный порядок нижних состояний  $\Gamma_7(\Gamma_1)$ ,  $\Gamma_6(\Gamma_3)$ , но при учете квазичастичных поправок, вызывающих больший сдвиг вверх уровня  $\Gamma_7(\Gamma_1)$ , последовательность состояний  $\Gamma_6(\Gamma_3)$ ,  $\Gamma_7(\Gamma_1)$ ,  $\Gamma_7(\Gamma_2)$  восстанавливается. Теоретические расчеты и согласуются с данными спектроскопической эллипсометрии. Проведен расчет оптических характеристик с использованием сетки специальных точек, генерируемых методом расширенной элементарной ячейки (РЭЯ)  $(8 \times 8 \times 8)$ , и с учетом 60 нижних энергетических зон. Интерпретация структур коэффициента отражения  $R(E)$  тройных полупроводников известна [6,7,10-12]. Основные пики  $R(E)$   $\text{ZnGeP}_2$  при энергиях около 3 и 5 эВ являются аналогами пиков  $E_1$  и  $E_2$  в  $R(E)$  GaP, вызванных переходами вблизи сфералитных критических точек  $L$  и  $X$ . Особенности вычисленного  $R(E)$  в целом согласуются со спектрами отражения  $\text{ZnGeP}_2$  в поляризованном свете [12]. Данный метод был применен и для изучения оптических свойств дефектных кристаллов.

## Электронные и фоновые состояния сверхрешеток

Изучена зависимость минизонных спектров сверхрешеток (CP)  $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_m(001)$  от толщины слоев и химического состава. За счет смешивания на гетерограницах состояний бинарных кристаллов тетрагональной компонентой кристаллического потенциала зона проводимости CP носит сложный, многодолинный характер. Наиболее сильные изменения происходят у состояний, локализованных в глубоких  $\Gamma$  и  $\bar{L}$  квантовых ямах (подчеркнуты сфералитные состояния). На рис.2 приведены элементарная ячейка и зонные спектры монослойной сверхрешетки  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1(001)$  и твердого раствора  $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$  в приближении виртуального кристалла (BK).

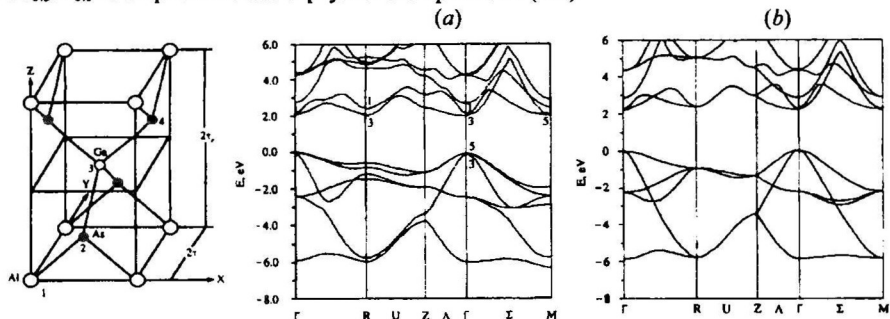


Рис.2. Элементарная ячейка и зонные структуры (a) сверхрешетки  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1(001)$  и (b) твердого раствора  $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$  в приближении BK. Валентная зона опущена.

Дну зоны проводимости этой CP отвечает состояние боковой долины  $R_3$ , происходящее из состояния  $\bar{L}_1$  виртуального кристалла. Конкурирующими являются состояния центральной долины  $\Gamma_3$ ,  $\Gamma_1$  и боковой долины  $M_5$ . Состояния  $\Gamma_3$  и  $\Gamma_1$  происходят из состояний BK  $\underline{X}_{3z}$  (при выборе начала координат на катионе) и  $\bar{\Gamma}_1$  соответственно. Их можно рассматривать как нижние состояния в  $\underline{X}_3(\text{AlAs})$  и  $\bar{\Gamma}_1(\text{GaAs})$  квантовых ямах. Двукратно вырожденное состояние  $M_5$  происходит из состояний BK  $\underline{X}_{3x}$  и  $\underline{X}_{3y}$ . Энергии состояний CP в согласии с экспериментом увеличиваются в последовательности  $R_3$ ,  $\Gamma_3$ ,  $M_5$ ,  $\Gamma_1$ . Кристаллическое расщепление потолка валентной зоны BK  $\Gamma_{15}$  на двумерное  $\bar{\Gamma}_5$  и одномерное  $\bar{\Gamma}_3$  состояния составляет 0.05 эВ. Непрямая запрещенная зона CP равна  $E_{\text{ind}}(R_3^c - \Gamma_5^v) = 1.96$  эВ. Псевдопрямой переход с энергией  $E_{g1}(\Gamma_3^c - \Gamma_5^v) = 1.97$  эВ слабо разрешен, поскольку он отвечает непрямому запрещенному переходу  $E_{\text{ind}}(\underline{X}_3^c - \bar{\Gamma}_{15}^v)$  в BK. Энергия первого интенсивного перехода равна  $E_{g2}(\Gamma_1^c - \Gamma_5^v) = 2.05$  эВ.

В сверхрешетках  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ ,  $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ ,  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3(001)$  нижние состояния зоны проводимости в  $\Gamma$  долине имеют симметрию  $\Gamma_1$ ,  $\bar{\Gamma}_1$  и  $\Gamma_3$  и происходят из состояний зоны проводимости виртуальных кристаллов (BK)  $\bar{\Gamma}_1$ ,  $\underline{X}_1$  и  $\underline{X}_3$  соответственно. Сверхрешетка  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$  с большей долей атомов Ga является, подобно GaAs, примозонным полупроводником, две другие сверхрешетки - псевдопримозонные полупроводники.

На рис.3 для примера приведена зонная структура  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ , которой в семействе сверхрешеток  $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_m(001)$  отвечают наименьшие по толщине слои, начиная с которых реализуются CP I – го типа. Эффекты размерного квантования наиболее сильно проявляются в состояниях, происходящих из  $\bar{\Gamma}$  и  $\bar{L}$  долин BK, поскольку слой GaAs выступает “мощной” квантовой ямой для  $\bar{\Gamma}$  состояний (глубиной 1.00 эВ) и  $\bar{L}$  состояний (глубиной 0.56 эВ). Тетрагональная составляющая потенциала понизила уровень BK  $\bar{\Gamma}_1$  на 0.20 эВ, расщепила два вырожденных в геометрии сверхрешетки  $\bar{L}$  состояния BK на состояния  $\underline{X}_3$  и  $\underline{X}_1$ , отстоящие друг от друга на 0.34 эВ. В результате



нижняя боковая долина  $X_3$  расположена гораздо ближе (0.06 эВ) к центральной  $\Gamma_1$  долине, чем  $\underline{L}$  долина к  $\underline{\Gamma}$  долине в GaAs (0.28 эВ). Для  $\underline{X}$  состояний монослой AlAs выступает в роли очень узкой и сравнительно мелкой (0.27 эВ) квантовой ямы. Поэтому эффекты размерного квантования слабо проявились в состояниях  $M_3$  и  $\Gamma_3$ , происходящих из  $\underline{X}$  состояний ВК. Эти состояния имеют почти совпадающие энергии и за счет влияния непрямого компонента AlAs расположены к  $\Gamma_1$  долине значительно ближе (0.26 эВ), чем  $\underline{X}$  долина к  $\underline{\Gamma}$  долине в GaAs (0.48 эВ). Проведен анализ волновых функций сверхрешеток.

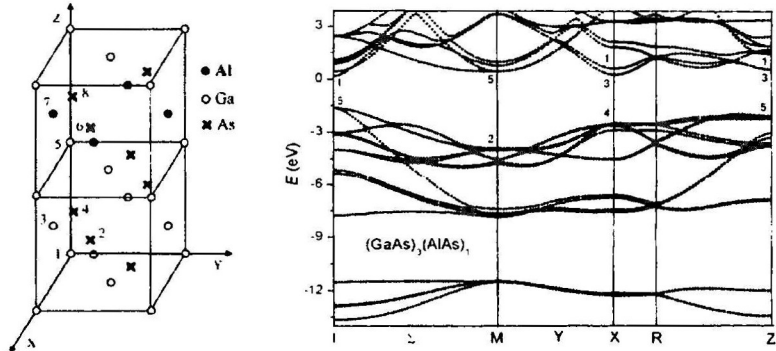


Рис.3. Элементарная ячейка и зонная структура сверхрешетки  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1(001)$ .

Фононный спектр  $\text{CP } \omega_s(\mathbf{q})$  ( $s$  – номер фононной ветви,  $\mathbf{q}$  – волновой вектор фонона) исследовался в феноменологической модели сил связи в приближении жестких ионов. Благодаря близости структурных параметров и других свойств GaAs и AlAs межатомное силовое поле в этих кристаллах отличается незначительно, а главные особенности колебательных состояний в GaAs, AlAs и CP связаны с разницей масс атомов Ga и Al. Поэтому параметры межатомного взаимодействия в AlAs и CP были выбраны такими же, как и в GaAs, что соответствует приближению дефекта масс.

На рис.4 показан фононный спектр и плотность фононных состояний монослойной сверхрешетки  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1(001)$ . Угловая дисперсия  $\Gamma$ - $\Gamma$  связана с тетрагональной симметрией CP.

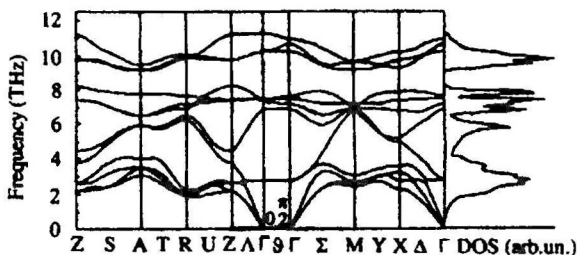


Рис.4. Фононный спектр и плотность фононных состояний (DOS) сверхрешетки  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1(001)$ .

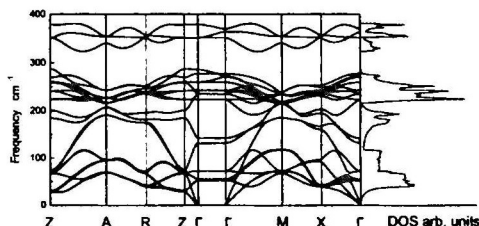


Рис.5. Фононный спектр и плотность фононных состояний (DOS) сверхрешетки  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1(001)$ .

кристаллами. В области оптических частот СР выделяются полосы, относящиеся к колебаниям отдельных связей Ga-As и Al-As. Эти полосы отделены щелями друг от друга и от акустической части спектра. Число ветвей в таких полосах пропорционально химическому составу СР. По сравнению с AlAs верхняя граница фононных спектров СР понижена за счет увеличения приведенной массы от вклада более тяжелых атомов Ga. Колебания атомов в сверхрешетках в основном являются колебаниями смешанного типа, в которых представлены продольные и поперечные колебания из оптических и акустических ветвей бинарных кристаллов. Фононам с симметрией  $M_5$  отвечают колебания атомов в основном либо только катионной, либо только анионной подрешеток. В фононах с симметрией  $X_1$  и  $X_3$  участвуют колебания всех атомов. Частоты длинноволновых фононов СР обнаруживают типичную для тройных соединений неаналитическую зависимость от взаимной ориентации волнового вектора фонона и тетрагональной оси кристалла. Из анализа матриц перекрывания векторов поляризации установлена связь колебаний атомов в бинарных кристаллах и СР.

Детально рассмотрено происхождение фононов, вызывающих интенсивные междолинные переходы в зоне проводимости СР. Фононы с большими частотами ( $\omega_s(q) > 9$  THz) связаны с колебаниями легких атомов Al. Частоты фононов  $X_3(7.338$  THz) в сверхрешетке  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$  и  $X_1(7.438$  THz) в сверхрешетке  $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$  близки к частоте продольных оптических колебаний GaAs  $L_1(7.32$  THz). Им отвечают колебания атомов Ga(1) и As(8), прилегающих к гетерогранице GaAs/AlAs (в скобках символа атома даны номера узлов ячейки, приведенной на рис.3). В аналогичном фононе сверхрешетки  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$   $X_3(7.228$  THz) колебания интерфейсных атомов также представлены с наибольшим весом, но за счет подмешивания поперечного оптического фонона GaAs  $L_3(7.15$  THz) в нем присутствуют заметные колебания атомов Ga(5) и As(4) внутри слоя GaAs. Фононы  $(M_1+M_4)$  в сверхрешетках  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$  и  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$ , и фонон  $M_5$  в сверхрешетке  $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$  происходят из продольного акустического  $X$  фонона в бинарных кристаллах с частотой 7.055 THz. Таким фононам отвечают колебания атомов As.

#### **Влияние интерфейсного потенциала на электронные состояния сверхрешеток $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_n(001)$**

Проведен анализ влияния плавного потенциала (ПП) вблизи гетерограниц на зонный спектр сверхрешеток  $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_n(001)$  ( $n < 20$ ). В случае модели резкой границы (РП) кристаллический потенциал представлялся в виде чередующихся вдоль тетрагональной оси потенциалов GaAs и AlAs, скачком переходящих друг в друга на гетерограницах. На рис.6 в качестве примера приведен минизонный спектр сверхрешетки  $(\text{GaAs})_4(\text{AlAs})_4(001)$ . Интерфейсный потенциал оказывает существенно разное влияние на зонные состояния СР. Наибольшие отличия результатов двух расчетов ( $\sim 0.03$  эВ) наблюдаются в СР с очень

Фононы с симметрией  $M_2$  и  $R_2$  соответствуют поперечным оптическим и акустическим колебаниям GaAs, а фононы с симметрией  $M_3$  и  $R_4$  - поперечным оптическим ТО и поперечным акустическим ТА колебаниям AlAs.

Фононный спектр сверхрешетки  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1(001)$  приведен на рис.5. Увеличение количества атомов в элементарной ячейке СР приводит к 4-х кратному росту числа фононных ветвей по сравнению с бинарными

тонкими слоями ( $n, m < 5$ ). Максимальное расхождение (0.043 эВ) имеет место для нижнего состояния монослойной сверхрешетки  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_1$ .

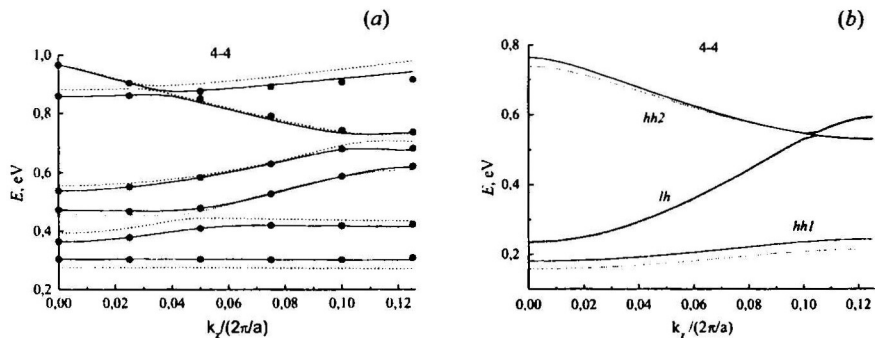


Рис.6. Минизонный спектр электронов (а) и дырок (б) СР  $(\text{GaAs})_4(\text{AlAs})_4(001)$  вдоль линии  $\Lambda$  тетрагональной зоны Бриллюэна. Энергии электронов (дырок) отсчитаны от дна зоны проводимости (потолка валентной зоны) GaAs ( $hh1$  и  $hh2$  – тяжелые дырки,  $lh$  – легкие дырки). Сплошные линии и точки – расчет с ПП, пунктирные линии – расчет с РП.

Во всех СР нижнее состояние зоны проводимости, происходящее из  $X_1$  состояния ВК, в модели с ПП расположено выше соответствующего состояния с РП. У состояния второй зоны проводимости СР, происходящего из  $\Gamma_1$  ( $\Gamma_1$  в случае монослойной СР)

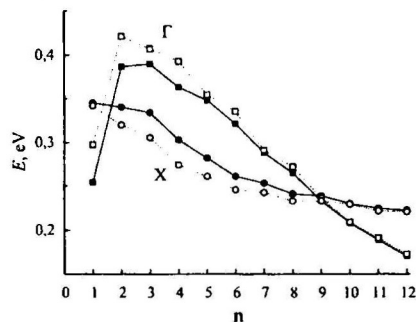


Рис.7. Энергии нижних состояний зоны проводимости сверхрешеток  $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_n(001)$  относительно дна зоны проводимости GaAs. Сплошные линии и заполненные символы – расчет с ПП, точечные линии и пустые символы – расчет с РП.

деформационные потенциалы (ДП) для всех актуальных каналов рассеяния электронов в зоне проводимости сверхрешеток.

Вероятность междолинного перехода электрона из начального блоховского состояния  $\Psi_{nk}$  ( $n$  – номер зоны,  $k$  – волновой вектор) в конечное блоховское состояние  $\Psi_{n'k'}$  кристалла за счет колебаний атомов решетки, отвечающих фонону  $s$ -ой ветви с

состояния ВК, соотношение обратное. Такой порядок уровней связан со смешиванием состояний плавным интерфейсным потенциалом, выступающим возмущением к потенциалу резкой границы.

Разница в зонных энергиях приводит к различию предсказаний двух моделей для толщины слоев, при которой состояние зоны проводимости СР меняет свой характер ( $\Gamma_1 \rightarrow X_2$ ). В модели с ПП конверсия зон СР происходит при числе монослоев  $n=9$ , в модели с РП – при  $n=10$  (рис.7). Это согласуется с данными по фотоотражению и фотолюминесценции [13], указывающих на пересечение прямых и не прямых переходов в СР при  $n \sim 10$ .

В третьей главе исследовано междолинное рассеяние электронов на коротковолновых фононах в бинарных соединениях  $A_3B_5$  и сверхрешетках  $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_m$ . Определены междолинные

волновым вектором  $q=k'-k$ , пропорциональна квадрату матричного элемента  $\langle \Psi_{n'k'} | \Delta V_{qs} | \Psi_{nk} \rangle$  потенциала возмущения  $\Delta V_{qs} = V_{qs} - V_{id}$ , вызванного смещениями атомов ( $V_{id}$  – кристаллический потенциал идеального кристалла,  $V_{qs}$  – потенциал кристалла со смещенными из равновесных узлов атомами). Усредненная по состояниям фононов полная вероятность междолинного рассеяния электрона имеет вид

$$W(nk, n'k') = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_q \frac{\hbar |D_{nk, n'k'}^s|^2}{2V\rho\omega_s(q)} \left( N_s(q) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \cdot \delta(E_{nk} - E_{n'k'} \pm \hbar\omega_s(q))$$

где  $V$  – объем кристалла,  $\rho$  – плотность кристалла,  $N_s(q)$  – равновесное число фононов. Знаки (+) и (-) отвечают поглощению и испусканию фононов соответственно. Модуль деформационного потенциала (ДП) равен:

$$|D_{nk, n'k'}^s| = \left| \sum_\gamma \left( \frac{M}{m_\gamma} \right)^{1/2} (e^\gamma(s, q) \cdot d^\gamma(nk, n'k')) \right|$$

где  $m_\gamma$  – масса атома сорта  $\gamma$ ,  $M = \sum_\gamma m_\gamma$  – масса элементарной ячейки,  $e^\gamma(s, q)$  – вектор поляризации фонона,  $d^\gamma(nk, n'k')$  – векторный матричный элемент градиента атомного псевдопотенциала  $V_\gamma$  с проекциями  $d_i^\gamma(nk, n'k') = \langle \Psi_{nk} | \frac{dV_\gamma}{dx_i} | \Psi_{n'k'} \rangle$ .

Междолинные ДП бинарных кристаллов рассчитывались с применением как *ab-initio*, так и эмпирических псевдопотенциалов. Оба расчета дают близкие результаты, согласующиеся с экспериментом. Поэтому ДП сверхрешеток определялись более простыми эмпирическими методами.

В сверхрешетках за счет понижения симметрии, реконструкции зонного и фононного спектров, а также изменения правил отбора для междолинных переходов число каналов рассеяния электронов значительно увеличивается по сравнению с бинарными кристаллами. На рис.8 приведена схема электронных переходов в зоне проводимости монослойной сверхрешетки (GaAs)<sub>1</sub>(AlAs)<sub>1</sub>(001). Сплошные линии отвечают электронным уровням, пунктирные – фононам, участвующим в переходе. Состояния, отвечающие второму лучу звезды R, обозначены чертой сверху.

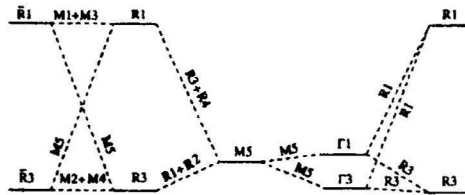


Рис.8. Схема междолинных переходов в зоне проводимости сверхрешетки (GaAs)<sub>1</sub>(AlAs)<sub>1</sub>(001).

Вычислены междолинные деформационные потенциалы  $D_{ij}^s$  ( $ij$  – номера долин) для рассеяния электронов в зоне проводимости монослойной СР. Для их анализа проведено сравнение с ДП GaAs, AlAs. Поскольку число каналов рассеяния в бинарных кристаллах и СР разное, то сравнивались усредненные ДП. Для электронных переходов в СР из ДП с

учетом вкладов от всех фононов  $\bar{D}_q = \sqrt{\sum_i (D'_{qj})^2}$  получены ДП, усредненные по родственным (к состояниям бинарных кристаллов) состояниям  $(ij)$ , в расчете на один электронный канал рассеяния  $\langle D_q \rangle = \sqrt{\frac{1}{h} \sum_{ij} \bar{D}_q^2}$ ,  $h$  - число родственных электронных состояний СР. Для GaAs и AlAs получены средневзвешенные ДП с учетом вкладов от всех фононов деформационные потенциалы  $\langle D_q \rangle = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\sum_i (D'_q(GaAs))^2} + \sqrt{\sum_i (D'_q(AlAs))^2} \right)$ ,

Табл.1. Усредненные междолинные деформационные потенциалы  $\langle D_y \rangle$  в сверхрешетке  $(\text{GaAs})_i(\text{AlAs})_{1-i}(001)$  и бинарных кристаллах для родственных электронных переходов, эВ/Å.

(GaAs) <sub>1</sub> (AlAs) <sub>1</sub>			A <sub>1</sub> B <sub>2</sub>			
Переход <i>i-j</i>	$\bar{D}_y$	$\langle D_y \rangle$	Переход <i>i-j</i>	$D'_y$		$\langle D_y \rangle$
				GaAs	AlAs	
$\Gamma_1-R_1$	5.58	4.5	$\Gamma_1-L_1$	3.51 (LA)	1.31 (LA)	4.3
$\Gamma_1-R_1$	3.03			0.08 (LO)	4.81 (LO)	
$\Gamma_1-R_1$	5.70	4.9	$X_3-L_1$	0.32 (LA)	3.01 (LA)	4.7
$\Gamma_3-R_3$	4.40			4.19 (LO)	2.59 (LO)	
$M_3-R_3$	7.27			0.68 (TA)	0.38 (TA)	
$M_3-R_1$	6.33			2.15 (TO)	2.22 (TO)	
$\Gamma_1-M_1$	7.3	7.3	$\Gamma_1-X_3$	3.85 (LA)	5.22 (LO)	6.5
$\Gamma_3-M_3$	12.2	12.2	$X_3-\bar{X}_3$	6.43 (LA)	9.15 (LO)	11.2
$R_1-\bar{R}_3$	0.07	0.9	$L_1-\bar{L}_1$	0.28 (LA)	0.45 (LA)	0.6
$R_3-\bar{R}_3$	0.81			0.64 (LO)	0.31 (LO)	
$R_3-\bar{R}_1$						
$R_1-\bar{R}_1$	1.70					

которые можно рассматривать как аппроксимацию ДП твердого раствора  $\text{Ga}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{As}$ .

Усредненные ДП сверхрешетки и бинарных кристаллов согласуются друг с другом (табл. 1). Переходы  $\Gamma_1$ - $R_3$ ,  $\Gamma_3$ - $R_3$ ,  $\Gamma_1$ - $M_5$ ,  $\Gamma_3$ - $M_5$  возникают при участии фононов  $R_1$ ,  $R_3$ ,  $M_5$ , которые сопровождаются колебаниями атомов Al и Ga. Такие каналы рассеяния должны играть важную роль в кинетических свойствах, поскольку они происходят между низшими зонами проводимости и им отвечают большие значения ДП.

Аналогичный анализ ДП проведен для сверхрешеток  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ ,  $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$ ,  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3(001)$ . На рис.9 в качестве примера приведена схема уровней зоны проводимости сверхрешетки  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$  в абсолютной шкале энергии.

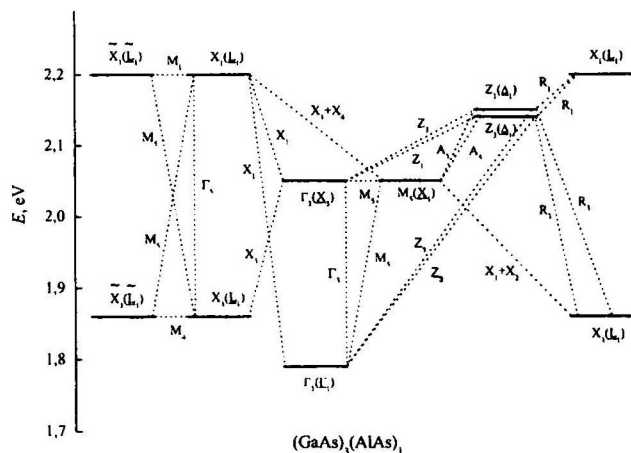


Рис.9. Схема уровней зоны проводимости СР  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$ . Около пунктирных линий указана симметрия фононов, вызывающих междолинный переход. В скобках - состояния ВК, дающие основной вклад в состояния СР.

Рассмотрено изменение деформационных потенциалов для различных каналов рассеяния в ряду СР и твердых растворов.

1) *Междолинное рассеяние*  $\Gamma_1\text{-}M_5$ ,  $\Gamma_1\text{-}M_1$ ,  $\Gamma_1\text{-}M_4$

Данные каналы рассеяния в СР являются аналогами  $\underline{\Gamma}\text{-}\underline{X}$  рассеяния ВК и поэтому, подобно ему, происходят в основном за счет колебаний катионов. Наиболее интенсивное рассеяние вызывают колебания легких атомов Al. В сверхрешетке  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1$  рассеяние электронов между  $\Gamma_1$  и  $M_5$  долинами происходит с участием фононов с частотами 6.527, 7.131 и 10.611 THz, в сверхрешетке  $(\text{GaAs})_2(\text{AlAs})_2$  - 9.679 THz, в сверхрешетке  $(\text{GaAs})_1(\text{AlAs})_3$  - 10.419 THz.

2) *Междолинное рассеяние*  $\Gamma_1\text{-}X_1$ ,  $\Gamma_1\text{-}X_3$

Эти каналы рассеяния в СР выступают аналогами  $\underline{\Gamma}\text{-}\underline{L}$  перехода ВК. Модуль вектора поляризации фонона данного перехода почти не меняется в ряду СР, поэтому различие в междолинных ДП связано со свойствами электронной подсистемы. Величины электронных констант зависят от свойств  $\Gamma$  и  $X$  волновых функций СР. В ряду сверхрешеток относительное изменение средней электронной плотности  $X_1$  и  $X_3$  состояний менее значительно, чем для  $\Gamma_1$  состояний. Поэтому различия в объединенном ДП для  $\Gamma_1\text{-}X_1$  и  $\Gamma_1\text{-}X_3$  рассеяний в основном определяются особенностями функций  $\Gamma_1$  состояний. Анализ показал, что модули волновых функций  $\Gamma_1$  в плоскости (001) для СР и ВК повторяют зависимость ДП  $\underline{\Gamma}\text{-}\underline{L}$  рассеяния в СР. Была сделана модельная оценка амплитуд волновых функций, учитывающая локализацию плотности вероятности состояния  $\Gamma_1(\underline{\Gamma}_1)$   $\rho_{SL} = |\psi_{SL}|^2$  в слоях GaAs. Плотность  $\rho_{SL}$  обратно пропорциональна

ширине квантовой ямы  $d$ , что позволяет представить ее в виде  $\rho_{SL} = \frac{m+n}{m} \rho_{VC}$ , где  $\rho_{VC} = |\psi_{VC}|^2$  - плотность вероятности ВК соответствующего состава. Такая модель хорошо согласуется с точным расчетом, что говорит о том, что главной причиной немонотонной зависимости константы  $\underline{\Gamma}\text{-}\underline{L}$  рассеяния в СР является локализация волновой функции  $\Gamma_1$  состояния в квантовой яме GaAs.

3) *Междолинное рассеяние*  $\Gamma_3\text{-}M_5$ ,  $\Gamma_1^{(1)}\text{-}M_1$ ,  $\Gamma_1^{(1)}\text{-}M_4$ ,  $M_5^{(1)}\text{-}M_5^{(2)}$ ,  $M_1\text{-}M_4$

Данные каналы рассеяния являются аналогами  $\underline{X}\text{-}\underline{\tilde{X}}$  рассеяния ВК и связаны с колебаниями катионов. Наибольшие значения ДП отвечают переходам  $\Gamma_3\text{-}M_5$  и  $M_5^{(1)}\text{-}M_5^{(2)}$ , происходящим за счет оптических колебаний атомов Al. Вследствие подобия электронных плотностей  $M$  и  $\Gamma(\underline{X})$  состояний усредненный деформационный потенциал  $\underline{X}\text{-}\underline{\tilde{X}}$  перехода меняется монотонно в ряду сверхрешеток.

4) *Междолинное рассеяние*  $X_1\text{-}\tilde{X}_1$ ,  $X_1\text{-}\tilde{X}_3$ ,  $X_3\text{-}\tilde{X}_3$

Эти каналы рассеяния являются аналогами  $\underline{L}\text{-}\underline{\tilde{L}}$  перехода ВК и связаны в основном с колебаниями анионов, электронная плотность вблизи которых почти не зависит от химического состава. Поэтому усредненные деформационные потенциалы для  $\underline{L}\text{-}\underline{\tilde{L}}$  перехода во всех СР близки.

5) *Междолинное рассеяние с участием Z долин*

Боковые долины  $Z_1$  и  $Z_3$  возникают в СР за счет взаимодействия состояний ВК с волновыми векторами  $\underline{\Delta}(0,0,0.25)$  и  $\underline{\Delta}(0,0,0.75)$ . Анализ волновых функций СР в точке  $Z$  показал, что основной вклад в них дает состояние ВК с вектором  $\underline{\Delta}(0,0,0.75)$ , расположенным вблизи сферической точки  $\underline{X}$ . Вес такого состояния практически один и тот же во всех СР, поэтому зависимости междолинных потенциалов  $\Gamma\text{-}Z$ ,  $M\text{-}Z$ ,  $X\text{-}Z$  переходов в ряду СР и твердых растворов подобны зависимостям потенциалов  $\Gamma\text{-}X$ ,  $M\text{-}X$ ,  $X\text{-}X$  переходов.

6) *Рассеяние между долинами, отвечающими одному и тому же волновому вектору*

В "прямых"  $\Gamma_1^{(1)}\text{-}\Gamma_1^{(2)}$  и  $\Gamma_1\text{-}\Gamma_3$  переходах участвуют длинноволновые оптические колебания с симметрией  $\Gamma_1$ , которым в структуре сферита отвечает коротковолновый  $\underline{X}$ -

фонон. При их расчете использовались электронные и фононные состояния из ближайшей окрестности  $\Gamma$  экстремума. Полученные ДП слабо зависят от величины и направления волнового вектора фонона. Междолинные переходы  $M_5^{(1)}-M_5^{(2)}$  и  $M_1-M_4$  происходят при участии длинноволновых акустических колебаний катионов. При вычислении ДП таких переходов использовались электронные состояния из окрестности точки  $M$ . В сверхрешетках  $(GaAs)_1(AlAs)_3$  и  $(GaAs)_3(AlAs)_1$  интенсивность  $M_5^{(1)}-M_5^{(2)}$  перехода почти не зависит от выбора таких состояний, тогда как в сверхрешетке  $(GaAs)_2(AlAs)_2$  подобная зависимость ДП перехода  $M_1-M_4$  носит сильно анизотропный характер. Вдоль линии  $\Sigma(\Gamma-M)$  значение ДП перехода  $M_1-M_4$  наибольшее и растет с увеличением модуля волнового вектора фонона  $q$ , достигая своего насыщения; вдоль линии  $Y(M-A)$  – его зависимость почти линейная; вдоль линии  $V(M-A)$  – потенциал близок к нулю.

На рис.10 приведены усредненные по родственным каналам ДП. Видно, что рассеяние электронов на фононах в СР в целом интенсивнее рассеяния в твердых растворах. Это является следствием локализации и роста амплитуд волновых функций в квантовых ямах СР.

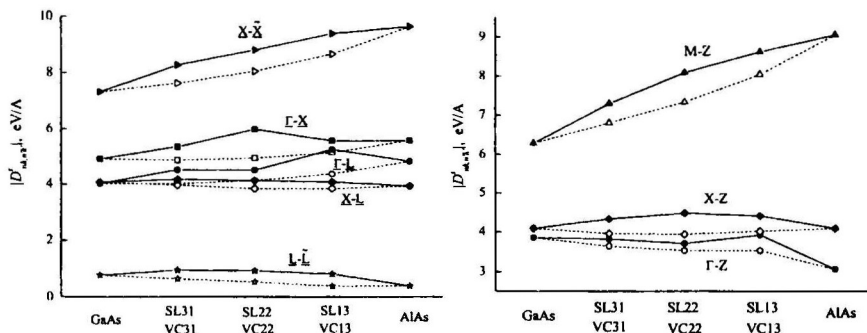


Рис.10. Усредненные междолинные ДП в СР (сплошные линии и заполненные символы) и ВК (пунктирные линии и незаполненные символы).

**В четвертой главе** рассмотрены глубокие уровни ( $\Gamma$ У) точечных дефектов, кластеров и электронные состояния квантовых точек. Проведена интерпретация оптических спектров собственных дефектов гексагонального нитрида бора  $h$ -BN, тройного полупроводника  $ZnGeP_2$  и сверхрешетки  $(GaAs)_3(AlAs)_1$  с вакансиями. Изучены особенности электронной структуры кластеров из атомов мышьяка и галлия в GaAs. Вычислена и проанализирована электронная структура и оптические свойства германиевых кластеров в кремнии. Исследованы электронные уровни пирамидальных квантовых точек  $w$ -GaN/AlN(0001).

Метод расчета  $\Gamma$ У тестирован на группе соединений  $A_4$ ,  $A_3B_5$ ,  $A_2B_6$ , для которых известно большое число данных теоретических расчетов и эксперимента.

#### **Глубокие уровни собственных дефектов $ZnGeP_2$**

Рассмотрены одиночные собственные дефекты  $ZnGeP_2$  - вакансии цинка  $V_{Zn}$ , германия  $V_{Ge}$ , фосфора  $V_P$  и антиструктурные дефекты  $Ge_{Zn}$ ,  $Zn_{Ge}$ ,  $Zn_P$ ,  $P_{Zn}$ ,  $Ge_P$ ,  $P_{Ge}$ . Некоторые из них являются нестабильными в равновесном состоянии кристалла, но могут возникать в процессе электронного и лазерного облучения.

Понижение симметрии решетки халькопирита по сравнению с аналогом GaP приводит к изменению состояний  $\Gamma$ У в  $ZnGeP_2$ . Нерелаксированные дефекты  $V_{Zn}$ ,  $Ge_{Zn}$ ,  $P_{Zn}$ ,  $V_{Ge}$ ,  $Zn_{Ge}$ ,  $P_{Ge}$  обладают симметрией группы деформированного тетраэдра  $S_4$ . Кристаллическое поле расщепляет трехкратно вырожденный глубокий уровень  $T_2(\Gamma_{15})$  кубического кристалла на однократный уровень с симметрией  $B(\Gamma_4)$  и двукратно

вырожденный уровень с симметрией  $E(\Gamma_5)$ . Нерелаксированные дефекты  $V_P$ ,  $Zn_P$ ,  $Ge_P$  имеют в ближайшем окружении разные атомы (Zn и Ge), что приводит к понижению точечной симметрии до группы  $C_2$  и расщеплению сферического уровня  $T_2$  на три одномерных уровня согласно разложению представления  $T_2=A+2B$ , где символом  $A$  обозначено симметричное представление, а символом  $B$  – представление антисимметричное относительно поворота на  $180^\circ$  вокруг оси  $y$ .

Для учета релаксации решетки вокруг дефектов использовались данные "атомистических" расчетов энергий образования дефектов [14], а также данные по релаксации дефектов в GaP и Ge, которые согласуются с результатами самосогласованных расчетов [15]. Положение ГУ нейтральных и заряженных дефектов в окрестности запрещенной зоны  $ZnGeP_2$  показано на рис.11.

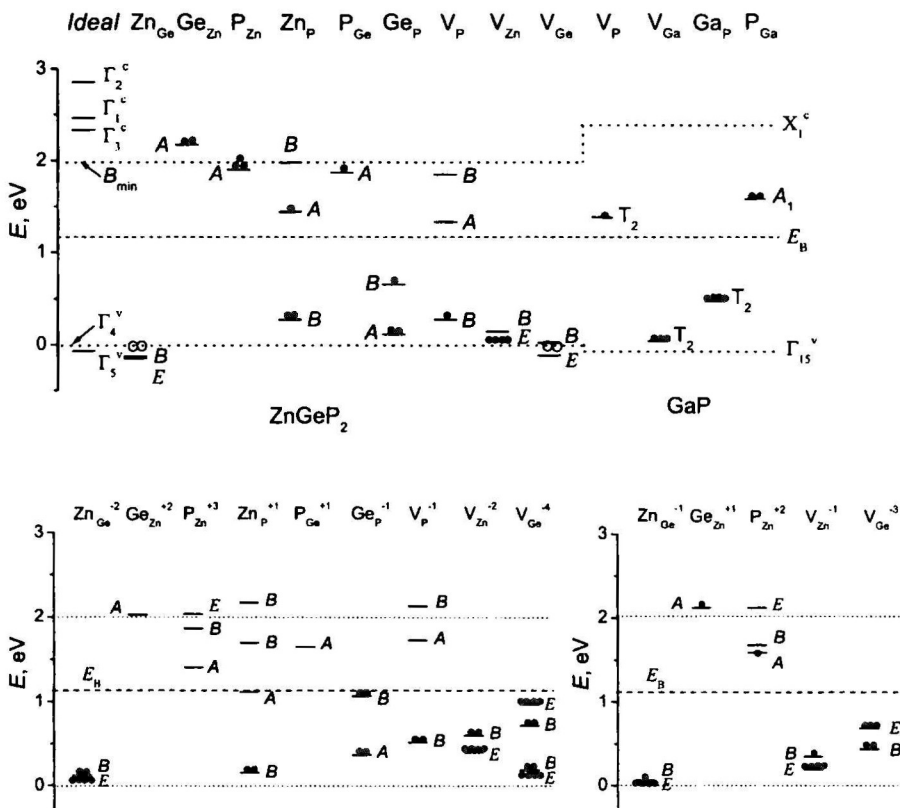


Рис.11. Глубокие уровни нейтральных и заряженных собственных дефектов в  $ZnGeP_2$  и нейтральных дефектов в GaP. Пунктирными горизонтальными линиями обозначены края запрещенной зоны идеального кристалла. Сплошными кружками показано заполнение уровней электронами, пустыми кружками - дырками.  $E_B$  – модельный уровень дефекта.

**Нейтральные дефекты.** Антиструктурные дефекты  $Zn_{Ge}$  и  $Ge_{Zn}$  создают резонансы акцепторного типа в валентной зоне и донорного типа в зоне проводимости



соответственно. Уровни “квазитриплета”  $E$  и  $B$  дефекта  $Zn_{Ge}$  почти вырождены, расщепление, вызванное кристаллическим полем, составляет лишь 0.0007 эВ. Донор  $P_{Zn}$  выталкивает из зоны проводимости в запрещенную зону уровень  $A$ , зарядовая плотность которого локализована на ковалентных связях  $P-Zn$ . Донорное  $s$  - подобное состояние  $A$  дефекта  $P_{Ge}$  расположено вблизи дна зоны проводимости. Акцептор  $Ge_P$  выталкивает из валентной зоны два ГУ.

“Мощный” потенциал акцепторного дефекта  $Zn_P$  расщепляет сфалеритный уровень  $T_2$  на три одномерных уровня, величина расщепления равна 1.71 эВ. Наиболее локализованным является состояние  $A$  вблизи середины запрещенной зоны, его плотность сосредоточена на ковалентной связи  $Zn_P-Zn$ , как и у верхнего менее локализованного состояния  $B$ . Плотность нижнего состояния  $B$  распределена вдоль связи  $Zn_P-Ge$ .

Глубокие уровни вакансии фосфора  $V_P$  вычислялись с учетом релаксации ближайших атомов  $Zn$  и  $Ge$ . Длины четырех оборванных связей уменьшались на 6.1%, как и у вакансии фосфора  $V_P$  в  $GaP$ . За счет большой разницы потенциалов  $Zn$  и  $Ge$  сфалеритный уровень  $T_2$  сильно (на величину 1.58 эВ) расщепляется на три одномерных уровня – один симметричный  $A$  и два антисимметричных  $B$ . Близкое положение глубоких уровней  $V_P$  и антиструктурного дефекта  $Zn_P$  на одном и том же узле демонстрирует, что достаточно мощный локализованный дефект отталкивания создает ГУ, энергия которого слабо зависит от детального вида потенциала дефекта. У вакансии цинка  $V_{Zn}$  ближайшее окружение испытывает существенную релаксацию. С учетом сдвигов атомов фосфора навстречу вакансии цинка, последняя выталкивает в запрещенную зону два глубоких акцепторных состояния – пустое с симметрией  $B$  и заполненное четырьмя электронами с симметрией  $E$ . Положение уровней  $E$  и  $B$  согласуется с данными LDA метода [15].

Расчет ГУ акцептора  $V_{Ge}$  проводился с 12% - ым уменьшением длин связей  $P-V_{Ge}$ , как у вакансии в кристалле  $Ge$ . Такая релаксация, однако, слабо влияет на положение уровней  $B$  и  $E$ , поскольку их волновые функции имеют малую амплитуду в окрестности атомов фосфора.

*Сравнение глубоких уровней нейтральных дефектов  $GaP$  и  $ZnGeP_2$ .* Для установления соответствия ГУ дефектов в  $ZnGeP_2$  и  $GaP$  было определено относительное положение зонных спектров на гетерогранице  $ZnGeP_2/GaP$ . Разрыв валентной зоны находился из условия сшивания уровней  $E_B$ , отвечающих модельным наиболее локализованным дефектным состояниям в запрещенной зоне двух кристаллов. Уровни  $E_B$  рассчитывались с учетом спин-орбитального взаимодействия, 12-ти специальных точек тетрагональной структуры и ~500 нижних зон. Из расчета ( $E_B(GaP)=1.25$  эВ,  $E_B(ZnGeP_2)=1.19$  эВ) следует, что потолок валентной зоны в  $GaP$  расположен ниже потолка валентной зоны в  $ZnGeP_2$  на величину  $\Delta E_v = 0.06$  эВ. С учетом разрыва зон уровнем  $T_2$  вакансии  $V_P$  в  $GaP$  с энергией  $E=1.43-0.06=1.37$  эВ, отсчитанной от потолка валентной зоны  $ZnGeP_2$ , соответствует средневзвешенный уровень ( $E=1.15$  эВ) трех состояний релаксированной вакансии  $V_P$  тройного соединения. Анализ зарядовой плотности этих состояний и плотности состояния вакансии  $V_P$  в  $GaP$  показал существенное влияние анизотропии электронной структуры  $ZnGeP_2$  на характер функций одного и того же дефекта. В то время как в бинарном кристалле  $GaP$  зарядовая плотность вдоль всех четырех связей распределена одинаково, в тройном соединении зарядовая плотность у нижнего состояния  $B$  сосредоточена на двух связях  $V_P-Ge$ , у верхнего состояния  $B$  – на двух связях  $V_P-Zn$ , а у симметричного состояния  $A$  – на четырех связях, но с разной плотностью в парах.

Уровню  $T_2$  вакансии  $V_{Ga}$  в  $GaP$  с энергией  $E=0.10-0.06=0.04$  эВ соответствует средневзвешенный уровень ( $E=0.01$  эВ) состояний  $E$  и  $B$  вакансии цинка и германия  $ZnGeP_2$ . Уровню  $T_2$  дефекта  $Ga_P$  в  $GaP$  с энергией  $E=0.53-0.06=0.47$  эВ соответствует усредненный уровень ( $E=0.49$  эВ) трех состояний  $B$ ,  $A$ ,  $B$  дефектов  $Zn_P$  и  $Ge_P$  тройного соединения. Аналогом уровня  $A_1$  дефекта  $P_{Ga}$  в  $GaP$  является средний уровень  $A$  дефектов  $P_{Zn}$  и  $P_{Ge}$  в  $ZnGeP_2$ . Его энергия с поправкой на зависимость от числа базисных функций  $E$

$= 1.88 - 0.13 = 1.75$  эВ согласуется с энергией уровня  $A_1$  дефекта  $P_{Ga}$  в GaP  $E = 1.64 - 0.06 = 1.58$  эВ.

**Анализ спектров ЭПР.** В экспериментальных спектрах обнаружены ЭПР активные центры  $V_{Zn}^{(-1)}$ ,  $V_P^{(0)}$ ,  $Ge_{Zn}^{(+1)}$ ,  $V_{Ge}^{(3)}$ . В полной темноте в постростовых и отожженных образцах наблюдается только сигнал однократно заряженной вакансии цинка  $V_{Zn}^{(-1)}$ . При лазерном облучении возникают ЭПР сигналы других дефектов, появление которых зависит от длины волны лазера. В облученных электронами образцах ЭПР сигналы в темноте отсутствуют, но последующая подсветка их инфракрасным излучением активизирует все перечисленные центры.

В компенсированных кристаллах вакансии цинка находится в диамагнитном состоянии  $V_{Zn}^{(-2)}$ . Энергия верхнего уровня с симметрией  $B$  (0.59 эВ) близка к энергии активации акцептора (0.5÷0.6) эВ, определенной из анализа электрофизических свойств. Наблюдающийся в ЭПР спектрах сигнал от вакансии цинка возникает за счет неполной компенсации ее парамагнитного состояния  $V_{Zn}^{(-1)}$ . Этот сигнал усиливается при фотоиндуцированной ионизации состояния  $V_{Zn}^{(-2)}$ .

Лазерное излучение с длиной волны 0.633 мкм вызывает (2÷3)-х кратное увеличение интенсивности сигнала  $V_{Zn}^{(-1)}$ , тогда как излучение с длиной волны 1.064 мкм, напротив, несколько уменьшает сигнал (~20%). Этот результат объясняется из анализа энергий и сил осцилляторов оптических переходов с участием  $V_{Zn}^{(-1)}$  и  $V_{Zn}^{(-2)}$ . Согласно расчету при облучении светом с длиной 0.633 мкм электроны из заполненного состояния  $B$   $V_{Zn}^{(-2)}$  могут возбуждаться во вторую зону проводимости  $\Gamma_{1c}$  и в нижнюю зону проводимости с волновым вектором в плоскости  $F$ , создавая парамагнитное состояние  $V_{Zn}^{(-1)}$ . Такие переходы сильно поляризованы – в основном поглощается необыкновенная волна ( $e$ -гау,  $E||c$ ).

Существенное уменьшение интенсивности сигнала  $V_{Zn}^{(-1)}$  наблюдается при лазерном излучении с длиной волны 1.895 мкм, причем оно не вызывает появления других ЭПР сигналов. Это можно объяснить возбуждением электронов из валентной зоны на уровень  $V_{Zn}^{(-1)}$ , в результате чего вакансии цинка переходит в непарамагнитное состояние  $V_{Zn}^{(-2)}$ .

ЭПР сигнал нейтральной вакансии фосфора  $V_P^{(0)}$  возникает только после облучения фотонами с энергией, не меньшей чем 0.64 эВ, причем он не имеет сверхтонкой структуры и менее интенсивен, что указывает на слабое взаимодействие неспаренного спина с атомами ближайших соседей. Это находит свое объяснение из сравнения зарядовой плотности данных центров. Зарядовая плотность антисимметричного состояния  $B$ , в котором находится неспаренный электрон дефекта  $V_P^{(0)}$ , распределена на 2-х связях  $V_P$ -Ge и имеет примерно в 3 раза меньшую величину в области атомов германия, чем зарядовая плотность состояния  $B$  дефекта  $V_{Zn}^{(-1)}$  в области атомов фосфора.

Антиструктурный дефект  $Ge_{Zn}$  в  $ZnGeP_2$  находится в двукратно ионизованном состоянии  $Ge_{Zn}^{(2)}$ . Парамагнитные центры  $Ge_{Zn}^{(+1)}$  возникают при лазерном облучении с длиной волны 0.633 мкм, но отсутствуют при облучении светом с длиной волны 1.064 мкм. Вычисленная энергия оптического перехода из валентной зоны на глубокий уровень  $A$  - дефекта  $Ge_{Zn}^{(2)}$  (2.02 эВ) соответствует энергии лазерного облучения ( $h\nu=1.96$  эВ).

**Поглощение света, вызванное точечными дефектами.** Проведена интерпретация спектров ИК - поглощения и фотоиндуцированных спектров ЭПР  $ZnGeP_2$ . На рис.12 показан коэффициент поглощения  $\alpha(E)$  кристалла  $ZnGeP_2$  с точечными дефектами  $V_P$  и  $V_{Zn}$ . Наиболее интенсивными являлись переходы с участием состояния зоны проводимости  $\Gamma_{1c}$  и нижних ГУ с симметрией  $B$  и  $E$ , функции которых построены в основном из состояний потолка валентной зоны  $\Gamma_4'$  и  $\Gamma_5'$  соответственно.

Первые пики поглощения в кристалле  $ZnGeP_2$  с  $V_P^{(0)}$  и  $V_{Zn}^{(-1)}$  связаны с переходами на ГУ из состояний с волновыми векторами, расположенными в глубине зоны Бриллюэна (линия  $R$ , точки  $(1/3,0,1/3)$ , плоскость  $F$ ). Энергии таких переходов несколько больше энергий ГУ, отсчитанных от потолка валентной зоны. Вакансия фосфора  $V_P^{(0)}$  дает вклад в

поглощение в области  $\sim 2$  мкм (пик  $E_1$ ) после лазерного облучения с длинами волн 1.064 мкм и 633 нм [16,17], переводящего ионизованное состояние  $V_P^{(-1)}$  в нейтральное состояние.

Поглощение волн  $\sim 2$  мкм при участии  $V_{Zn}^{(-1)}$  (пик  $E_1$ ) связано с переходами из валентной зоны на глубокий уровень  $B$ . Исследование в поляризованном свете показывает, что поглощение необыкновенной волны интенсивнее поглощения обыкновенной волны и коррелирует с фотоиндуцированным ЭПР сигналом  $V_{Zn}^{(-1)}$ . В согласии с этим расчет дает более сильные первый, третий и четвертый пики поглощения для необыкновенной волны за счет переходов валентная зона  $\rightarrow V_{Zn}^{(-1)}$ .

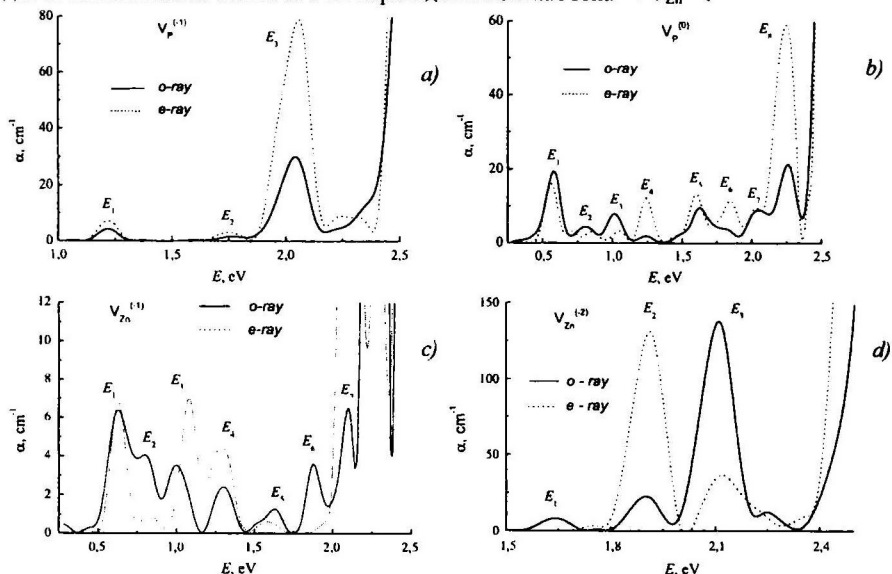


Рис.12. Коэффициент поглощения  $ZnGeP_2$  с нейтральными  $V_P^{(0)}$  (b) и заряженными  $V_P^{(-1)}$  (a) вакансиями фосфора; заряженными вакансиями цинка  $V_{Zn}^{(-1)}$  (c) и  $V_{Zn}^{(-2)}$  (d). Концентрация дефектов -  $10^{17} \text{ см}^{-3}$ .

Широкое плато в экспериментальном коэффициенте поглощения в области  $\sim 1$  мкм можно связать с переходами из состояний валентной зоны (точки  $(1/3, 0, 1/3)$ , 15 зона) на глубокий уровень  $B$  — однократно заряженной вакансии цинка  $V_{Zn}^{(-1)}$  (пик  $E_3$ ), внутризонными переходами  $A \rightarrow B$  однократно заряженной  $V_P^{(-1)}$  (пик  $E_1$ ) и нейтральной  $V_P^{(0)}$  (пик  $E_3$ ) вакансии фосфора, переходом  $B \rightarrow$  (зона проводимости) нейтральной вакансии фосфора  $V_P^{(0)}$  (пик  $E_3$ ), а также переходами из валентной зоны (линия  $B$ , 15 зона) на уровень  $B$  нейтральной вакансии фосфора  $V_P^{(0)}$  (пик  $E_4$ ). Это поглощение растет пропорционально интенсивности ЭПР - сигнала от центра  $V_{Zn}^{(-1)}$  за счет индуцированного лазерным излучением ( $\lambda=0.633$  мкм) изменения зарядового состояния  $V_{Zn}^{(-2)} \rightarrow V_{Zn}^{(-1)}$ , которому отвечает пик поглощения  $V_{Zn}^{(-2)}$  при энергии  $E_3=2.1$  эВ.

В  $ZnGeP_2$  с дефектами  $V_P^{(-1)}$  и  $V_{Zn}^{(-2)}$  поглощение длинных волн  $(1\div 3)$  мкм отсутствует, а в области коротких волн  $\lambda < 1$  мкм имеются интенсивные пики  $\alpha(E)$ , связанные с переходами с глубоких уровней в зону проводимости. Эти пики сдвинуты в сторону меньших энергий по сравнению с пиками  $\alpha(E)$  центров  $V_P^{(0)}$  и  $V_{Zn}^{(-1)}$ , что согласуется с наблюдающимся уменьшением поглощения длинных волн и увеличением поглощения коротких волн в облученных электронами кристаллах. Для всех переходов

заметна поляризационная зависимость, в целом сильнее поглощается необыкновенная волна, что согласуется с экспериментальными спектрами.

**Поглощение света, вызванное сложными дефектами.** Изучены глубокие уровни  $\text{ZnGeP}_2$  с кластерами  $\text{GeP}$ , содержащими 7, 13 и 19

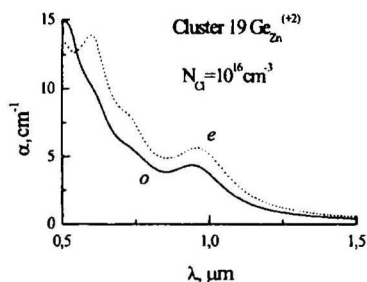


Рис.13. Коэффициент поглощения  $\text{ZnGeP}_2$  с кластерами из 19 заряженных антиструктурных дефектов  $\text{Ge}_{\text{Zn}}^{++}$ . Концентрация кластеров  $N_{\text{Cl}}=10^{16} \text{ см}^{-3}$ .

антиструктурных дефектов  $\text{Ge}_{\text{Zn}}^{++}$ . В наибольшем кластере 19 дефектов располагаются в двух элементарных ячейках. Вычисленный для него коэффициент поглощения показан на рис.13. Его вид подобен наблюдаемым спектрам. Первый пик связан с переходами электронов с потолка валентной зоны на нижние кластерные уровни. С ростом размеров кластеров поглощение в области длинных волн увеличивается.

Показано, что на глубокие уровни вакансии фосфора сильно влияют близко расположенные к ней антиструктурные дефекты  $\text{ZnGe}$ ,  $\text{Ge}_{\text{Zn}}$ , что приводит к низкоэнергетическим оптическим переходам, которые тоже могут вызывать ИК поглощение.

### Глубокие уровни вакансий в сверхрешетке $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1(001)$

Симметрия сверхрешетки  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1(001)$  зависит от положения дефектов. Если дефект, с которым связано начало отсчета системы координат, поместить в узел Al или в узел среднего из Ga слоев (av), то группа симметрии сверхрешетки с дефектом есть  $D_{2d}^5$ , если же дефект помещен в узел As (в средний слой - av или в ближайшие к Al слои - ed) или в узел Ga в слоях, ближайших к слою Al (ed), то группа симметрии есть  $C_{2v}^{20}$ .

На рис.14 показано положение глубоких уровней в запрещенной зоне сверхрешетки и ее компонентах с учетом разрывов валентной зоны на гетерограницах:  $\Delta(E_{\Gamma_{15v}}(\text{GaAs}) - E_{\Gamma_{15v}}(\text{AlAs}))=0.51 \text{ эВ}$ ,  $\Delta(E_{\Gamma_{5v}}(\text{Ga}_3\text{Al}_1\text{As}) - E_{\Gamma_{15v}}(\text{AlAs}))=0.40 \text{ эВ}$ ,  $\Delta(E_{\Gamma_{15v}}(\text{GaAs}) - E_{\Gamma_{5v}}(\text{Ga}_3\text{Al}_1\text{As}))=0.11 \text{ эВ}$ . Усредненные положения ГУ вакансий в бинарных кристаллах (отдельно для катионов и анионов) и сверхрешетке согласуются с точностью  $\sim 0.05 \text{ эВ}$ .

Понижение симметрии сверхрешетки приводит к расщеплению вырожденного

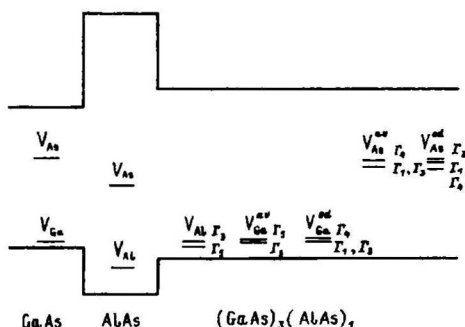


Рис.14. Схема уровней вакансий в запрещенных зонах GaAs, AlAs и сверхрешетки  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1(001)$  с учетом разрывов зон.

сферического уровня  $T_2$ . Для вакансий Al и Ga(av) с точечной симметрией  $D_{2d}$  уровень  $T_2$  расщепляется на однократный уровень  $\Gamma_3$  и двукратный уровень  $\Gamma_5$ . Для вакансии мышьяка, расположенной непосредственно на гетерогранице As(ed) и вакансии галлия в крайних слоях Ga(ed) с точечной симметрией  $C_{2v}$  вырождение уровня  $T_2$  снимается полностью ( $\Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4$ ). Вакансия As(ed) приводит к наибольшему расщеплению уровня  $T_2$  (0.07 эВ) из-за максимального потенциала возмущения, вызванного разницей потенциалов двух атомов Ga и двух атомов Al ближайшего окружения вакансии As. При переносе вакансии Ga

из среднего слоя в крайний слой более низкому ГУ отвечает состояние  $\Gamma_3$ , локализованное на связях, направленных в сторону гетерограницы в плоскости  $(1\bar{1}0)$ , а верхнему ГУ - состоянию  $\Gamma_4$ , локализованное на связях, направленных в сторону от гетерограницы в ортогональной плоскости  $(110)$ . В зависимости от того, в каком из крайних слоев расположена вакансия, верхний уровень будет иметь симметрию  $\Gamma_3$  или  $\Gamma_4$ . Оптический переход с этого локального уровня из состояний  $\Gamma_3$  и  $\Gamma_4$  в зонное состояние  $\Gamma_1$  разрешен для разных поляризаций излучения при нормальном падении света на плоскость сверхрешетки. Поэтому при обнаружении поляризационной зависимости поглощения на таких переходах можно сделать вывод о преимущественном геометрическом распределении вакансий Ga.

#### ***Глубокие уровни вакансий в h-BN***

Изучены глубокие уровни вакансий в гексагональном нитриде бора h-BN. Одиночная нейтральная вакансия азота создает два глубоких уровня в запрещенной зоне. Нижний уровень  $A_1$  расположен при энергии 3.75 эВ относительно потолка валентной зоны  $H^v$ , на нем находится один неспаренный электрон, поэтому вакансия азота является донором. Незанятый двукратно вырожденный уровень с симметрией  $E$  (4.41 эВ) расположен вблизи дна зоны проводимости.

Дивакансия азота из ближайших в плоскости слоев дефектов  $(2-V_N)$  создает в запрещенной зоне h-BN четыре одномерных уровня, которые можно рассматривать как результат "взаимодействия" состояний двух одиночных  $V_N$ . Нижний глубокий уровень  $A$  расположен при энергии 1.41 эВ и полностью заполнен. Остальные уровни - пустые.

Тривакансия азота  $(3-V_N)$  из 3-х ближайших дефектов  $V_N$ , лежащих в вершинах треугольника в базальной плоскости, создает в запрещенной зоне h-BN четыре уровня. Уровень с симметрией  $A$  (0.15 эВ) заполнен двумя электронами и расположен вблизи потолка валентной зоны. Двукратно вырожденный уровень с симметрией  $E$  (1.88 эВ) заполнен одним электроном, у которого имеется заметная плотность вероятности нахождения в области ядер бора, поэтому тривакансия азота может выступать парамагнитным центром.

Сопоставление результатов расчета оптических переходов с участием ГУ вакансий азота и их комплексов с данными термоактивационной и оптической спектроскопии пиролизического h-BN до и после нейтронного и термического воздействия позволило установить природу формирования сильных полос поглощения, люминесценции и фотопроводимости, разделить вклады в спектры вакансионных кластеров.

#### ***Электронная структура кластеров из атомов мышьяка в GaAs***

Исследованы закономерности в электронных состояниях GaAs с малыми кластерами мышьяка в зависимости от размеров и способа заполнения атомами мышьяка. Рассмотрены "сферические" кластеры, содержащие 17, 29 и 35 атомов As, расположенных в координационных сферах.

**Кластер из 17 атомов мышьяка.** Данный кластер создает три локализованных состояния в окрестности запрещенной зоны GaAs. Два состояния обладают симметрией  $A_1$  и имеют энергии 0.58 и 1.56 эВ (относительно потолка валентной зоны идеального GaAs); третье состояние трехкратно вырождено, имеет симметрию  $T_2$  и энергию 1.20 эВ. В запрещенную зону попадают нижний из уровней  $A_1$  и уровень  $T_2$ , полностью заполненные электронами. Второй пустой уровень  $A_1$  находится в зоне проводимости и является "резонансом". Поэтому кластер из 17 атомов As является многозарядным донором. Положение уровней показано на рис.15а.

Нижние кластерные уровни  $A_1$  и  $T_2$  генетически связаны с 4-мя состояниями  $A_1$  антиструктурных дефектов  $As_{Ga}$  первого слоя. За счет взаимодействия этих состояний четырехкратно вырожденный уровень  $A_1$  с энергией  $E_{A_{Ga}} = 1.10$  эВ расщепляется согласно  $4E_{A_{Ga}} = A_1 + T_2$ . Распределение электронной плотности кластерных состояний в основном

определяется наложением зарядовых плотностей состояний четырех одиночных дефектов  $As_{Ga}$ , центрированных на атомах Ga первого слоя.

**Кластер из 35 атомов мышьяка.** Данный кластер создает три уровня типа  $A_1$  с энергиями -0.15, 0.74, 1.40 эВ; три трехкратно вырожденных уровня  $T_2$  с энергиями 0.45, 0.95, 1.50 эВ; один двукратно вырожденный уровень  $E$  с энергией 1.33 эВ; один трехкратный уровень типа  $T_1$  с энергией 1.70 эВ. Первый из уровней  $A_1$  с энергией -0.15 эВ лежит ниже края валентной зоны, а трехкратный уровень  $T_1$  располагается в зоне проводимости. Положение уровней показано на рис.15b.

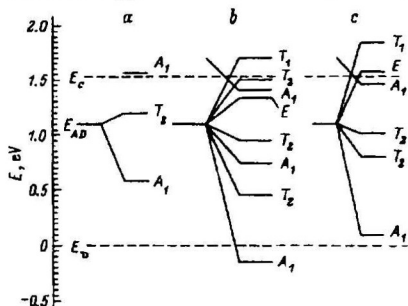


Рис.15. Схема локализованных состояний вблизи запрещенной зоны GaAs: *a* - 17 атомный кластер, *b* - 35 атомный кластер, *c* - кластер из 31 атома.

со схемой *b* они сдвинуты вверх, отсутствуют состояние  $A_1$  между двумя нижними уровнями  $T_2$  и состояние  $T_2$  вблизи дна зоны проводимости. Порядок следования уровней сохранился. Расщепление уровня антиструктурных дефектов третьего слоя дается соотношением  $12E_{As_{Ga}} = A_1 + E + T_1 + 2T_2$ . Второй вычисленный уровень  $A_1$  (1.46 эВ) не входит в это разложение и имеет другую природу.

Остальные состояния кластера из 35 атомов мышьяка порождаются антиструктурными дефектами третьего слоя. В состоянии  $A_1$  с энергией 1.40 эВ дают вклад верхние уровни типа  $A_1$  первого и второго слоя, происходящие из зоны проводимости. Все уровни, лежащие в запрещенной зоне, заняты, а уровень  $T_1$ , расположенный в зоне проводимости, заполнен на 2/3. За счет пересхода электронов с этого уровня в зону проводимости происходит ионизация этого уровня и "металлизация" арсенида галлия.

**Кластер из 29 атомов мышьяка.** Симметрия и энергии кластерных состояний следующие: *a* - ( $A_1$ , -0.36 эВ), *b* - ( $A_1$ , 0.77 эВ), *c* - ( $T_2$ , 0.28 эВ), *d* - ( $T_2$ , 0.83 эВ), *e* - ( $T_2$ , 1.32 эВ), *f* - ( $E$ , 1.07 эВ), *g* - ( $T_1$ , 1.53 эВ). Если бы отдельные дефекты кластера не взаимодействовали друг с другом, то в запрещенной зоне арсенида галлия находился один 13-тикратно вырожденный уровень  $E_{As_{Ga}}$ . За счет взаимодействия этот уровень расщепляется на

сумму шести уровней  $E_{As_{Ga}} = 2A_1 + E + 2T_2 + T_1$ , которым можно сопоставить рассчитанные уровни *a*, *b*, *c*, *d*, *f*, *g*. Поскольку вблизи края зоны проводимости нет состояний с симметрией  $T_1$ , а вблизи края валентной зоны нет состояний типа  $A_1$ , уровень *g* ( $T_1$ , 1.52 эВ) "провалился" в валентную зону. Состояние *e* ( $T_2$ , 1.32 эВ) происходит из состояний, лежащих в зоне проводимости (например, из расщепившихся резонансных уровней одиночного антиструктурного дефекта  $E_{As_{Ga}}$ ). Все состояния ниже дна зоны проводимости полностью заполнены, поэтому кластер из 29 атомов As проявляет себя как многозарядный донор.



## Электронная структура кластеров из атомов галлия в GaAs

Изучены электронные состояния малых галлиевых кластеров в GaAs и сверхрешетке  $(\text{GaAs})_n(\text{Ga})_n$ , моделирующих плоскую границу металл/полупроводник. Рассмотрены “сферические” кластеры из атомов Ga, центрированные на анионном узле и содержащие до 11 координационных сфер. В таких кластерах находится 5, 29, 47, 87, 123 и 159 атомов Ga. Одиночный антиструктурный дефект  $\text{Ga}_{\text{As}}$  создает в запрещенной зоне GaAs один уровень  $\Gamma_2$  с энергией 0.28 эВ относительно потолка валентной зоны. Зарядовая плотность этого уровня менее локализована по сравнению с плотностью более глубокого состояния  $A_1$  дефекта  $\text{As}_{\text{Ga}}$ , что приводит к более сильной гибридизации функций соседних дефектов  $\text{Ga}_{\text{As}}$  в кластерах. Энергия, симметрия и степень заполнения верхнего заполненного электронами состояния меняются в зависимости от размеров кластеров. Для кластера из 159 атомов щель между нижним пустым уровнем с симметрией  $\Gamma_{25}$  и верхним полностью заполненным уровнем  $\Gamma_{15}$  равна 0.06 эВ. На рис.16 показано изменение уровня Ферми  $E_F$  от числа координационных сфер с дефектами ( $N$ ) в кластере. В скобках указана симметрия последнего заполненного состояния в кластерах и степень его заполнения. Положение  $E_F$

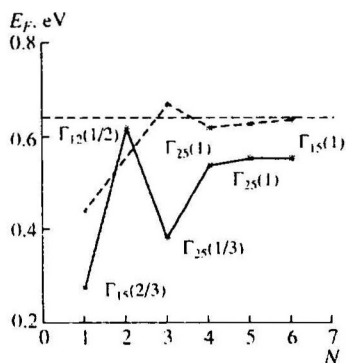


Рис.16. Зависимость уровня Ферми  $E_F$  от числа дефектов  $\text{Ga}_{\text{As}}$  в кластерах (сплошная линия) и сверхрешетке  $(\text{GaAs})_n(\text{Ga})_n$  (пунктирная линия).

определено как середина щели между верхним заполненным и нижним пустым состояниями. Для малых кластеров ( $N=1,2,3$ ) энергия  $E_F$  меняется немонотонно, с дальнейшим ростом  $N$  она приближается к предельному значению  $\sim 0.55$  эВ. Для выяснения природы состояний, расположенных вблизи уровня Ферми, проведен расчет ГУ кластера, в котором сделана замена атомов As на атомы Ga только во внешней 10-ой координационной сфере (24 дефекта).

Последнее, полностью заполненное состояние такого кластера преобразуется по представлению  $\Gamma_{12}$  и имеет энергию, близкую к энергии состояния  $\Gamma_{15}$  кластера из 159 атомов. Уровни Ферми этих двух кластеров также близки. Анализ зависимости величины заряда  $Z(r)$  внутри сферы от ее радиуса  $r$  и радиальной плотности в расчете на единицу площади сферы  $S_r$ , равной  $(\partial Z(r)/\partial r)/S_r$ , показывает, что плотности состояний одинаковой симметрии в окрестности гетерограницы в этих кластерах подобны. У состояний с симметрией  $\Gamma_{12}$  основной

заряд расположен вблизи границы металл/полупроводник. Это свидетельствует о том, что ГУ, формирующие барьер Шоттки, определяются состояниями, порожденными внешним слоем из антиструктурных дефектов  $\text{Ga}_{\text{As}}$ .

Изучена зависимость энергии  $E_F$  от толщины слоя металла в сверхрешетках  $(\text{GaAs})_n(\text{Ga})_n(001)$ ,  $n$  – число монослоев ( $n=1, \dots, 6$ ). Металлические слои рассматривались в структуре цинковой обманки и получались добавлением к GaAs плоскостей из антиструктурных дефектов  $\text{Ga}_{\text{As}}$ . Рассчитанная зависимость энергии последнего заполненного состояния от толщины слоев сверхрешетки приведена на рис.16. Значениям  $N=1, \dots, 6$  соответствуют кластеры из 5, 29, 47, 87, 123 и 159 атомов и сверхрешетки с  $n=N$  монослоями. Основное изменение  $E_F$  происходит при учете первых 2-3 монослоев. При числе монослоев  $n=6$  энергия Ферми стабилизируется и равна 0.64 эВ. С учетом поправки на спинорбитальное расщепление валентной зоны GaAs (0.11 эВ) получается значение 0.53 эВ, которое согласуется с экспериментальной высотой барьера Шоттки для плоской границы GaAs/Ga(110) 0.56(0.59) эВ для  $p(n)$  - типа легирования GaAs [18].

## Электронная структура германиевых кластеров в кремнии

Рассмотрены "сферические" германиевые кластеры в Si из атомов германия, расположенных в координационных сферах. Расчет электронных состояний проводился с использованием двух РЭЯ с размерами  $(8 \times 8 \times 8)$  и  $(10 \times 10 \times 10)$ , что позволило установить зависимость спектра, как от размеров, так и от плотности кластеров в матрице. Отличия постоянных решеток кристаллов Si и Ge приводят к деформации кластеров, которая при их малых размерах близка к однородной.

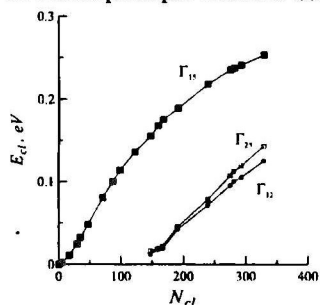


Рис. 17. Зависимость энергий глубоких уровней  $E_{cl}$  от числа  $N_{cl}$  атомов Ge в кластерах. Энергии уровней отсчитаны от потолка валентной зоны идеального кристалла Si.

Результат расчета с РЭЯ  $(10 \times 10 \times 10)$  показывает (рис.17), что потенциал дефектов выталкивает в запрещенную зону Si полностью заполненные электронами глубокие уровни с симметрией  $\Gamma_{15}$ ,  $\Gamma_{25}$ ,  $\Gamma_{12}$ , энергии которых  $E_{cl}$  монотонно увеличиваются с ростом числа атомов германия  $N_{cl}$ , приближаясь к дну квантовой ямы Ge. Состояния с симметрией  $\Gamma_{15}$  возникают во всех кластерах, тогда как состояния с симметрией  $\Gamma_{25}$  и  $\Gamma_{12}$  появляются лишь в кластерах, содержащих достаточно большое число атомов Ge ( $N_{cl} > 123$ ). Возникновение состояний с симметрией  $\Gamma_{25}$  и  $\Gamma_{12}$  зависит от плотности кластеров - в расчете с РЭЯ  $(8 \times 8 \times 8)$  такие состояния отсутствуют. Увеличение доли Ge в кластерном материале, приводит к смещению уровней  $E_{cl}$  вглубь запрещенной зоны на величину  $\sim 0.03$  эВ, почти не зависящую от размеров кластеров. Этот сдвиг связан с усилением гибридизации состояний соседних кластеров при их сближении. Анализ волновых функций с симметрией  $\Gamma_{15}$  показал, что они обладают свойствами, присущими однодолинному  $\Gamma_{15}$  приближению метода эффективной массы.

Был проведен расчет дырочных состояний кластеров в рамках такого приближения.

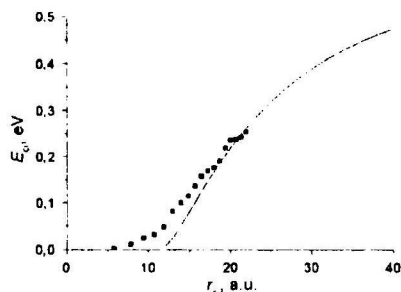


Рис. 18. Зависимость глубокого уровня от радиуса кластера  $r_{cl}$ . Точки - псевдопотенциальный расчет, сплошная линия - расчет методом эффективной массы.

Кластеры рассматривались в виде сферических квантовых точек с радиусами  $r_{cl}$ , равными средним значениям от радиусов последней координационной сферы кластеров и следующей за ней сферы, заполненной атомами Si, что соответствует приближению резкой гетерограницы. Сшивание огибающих функций на сфере приводит к уравнению для энергий германиевой квантовой точки ( $w$ ):

$$kr_{cl} \text{ctg}(kr_{cl}) = 1 - \frac{m_w}{m_b} (1 + \lambda r_{cl}), \quad k = (2m_w E)^{1/2} / \hbar$$

- волновой вектор в яме,  
 $\lambda = (2m_b (\Delta E_v - E))^{1/2} / \hbar$  - декремент затухания в барьере ( $b$ ) из кремния.

Использовались вычисленные значения усредненных по направлениям эффективных масс тяжелых дырок кремния  $m_b(\text{Si}) = 0.45m_0$  и деформированного германия  $m_w(\text{Ge}) = 0.35m_0$ . Разрыв валентной зоны  $\Delta E_v = 0.63$  эВ определялся из разницы рассчитанных энергий потолка валентной зоны деформированного германия и недеформированного кремния. Вычисленные энергии уровней  $E_{cl}$  приведены на рис.18. Для небольших кластеров метод эффективной массы дает существенно менее глубокие уровни, локализованное состояние возникает в



кластерах с радиусом большим 12 а.е.. С ростом размеров кластеров результаты метода эффективной массы приближаются к псевдопотенциальному расчету. Для кластеров с числом атомов, большим 200, и радиусами, большими  $\sim 2$  нм, энергии  $E_{cl}$  двух расчетов практически совпадают. Быстрая сходимость результатов обусловлена сильной локализацией волновой функции ГУ вследствие больших значений разрыва валентной зоны и эффективной массы дырок.

Анализ отличий результатов двух расчетов показал, что погрешность метода эффективной массы в приближении резкой границы (0.03 эВ) для кластера из 35 атомов Ge на 30% (0.01 эВ) обусловлена влиянием плавной границы и на 70% (0.02 эВ) – эффектами смешивания состояний тяжелых дырок из окрестности потолка валентной зоны кремния.

Проведен расчет коэффициента поглощения кластерного материала. В области энергий 0.5–3.0 эВ наблюдается избыточное по отношению к идеальному кремнию оптическое поглощение, величина и спектральный состав которого зависят от размеров кластеров. Особенности структуры  $\alpha(E)$  связаны с непрямыми в прямом и обратном пространствах электронными переходами между заполненными уровнями германиевых кластеров и объемными состояниями зоны проводимости кристаллов Si. С ростом размеров кластеров происходит сдвиг спектра поглощения в длинноволновую область в сторону узкозонного кристалла Ge, что вызвано увеличением энергии ГУ по отношению к потолку валентной зоны Si и ростом интенсивности оптических переходов в нижние состояния зоны проводимости.

#### **Электронная структура и оптические свойства пирамидальных квантовых точек GaN в AlGaN**

Рассмотрен периодический массив квантовых точек GaN в матрице AlN с катионной поверхностью роста, при которой вектор спонтанной поляризации  $P_{\text{спонт}}$  направлен против гексагональной оси  $z$  [0001]. Квантовые точки (КТ) имеют вид усеченных пирамид с гексагональным основанием, высота пирамиды равна  $2c \sim 1$  нм, диаметры описанных окружностей нижнего и верхнего оснований пирамид равны  $6a$  и  $2a$ . Пространственная группа симметрии сверхрешетки из квантовых точек –  $C_{3v}^1$ . Распределение деформаций по объему сверхрешетки учитывалось методом [19], оно существенно неоднородное. Наибольшие деформации возникают на границе матрицы  $w$ -AlN и пирамиды, в их глубине деформации малы. Пирамида сжата по разным направлениям, в среднем деформации равны  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \approx -0.008$ ,  $\epsilon_{zz} \approx -0.011$ . В точках, расположенных на гексагональной оси, матрица сжата вдоль оси  $\epsilon_{zz} \approx -0.015$  и растянута в базальной плоскости  $(xy)$   $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \approx 0.009$ . В плоскостях, проходящих через основание и вершину пирамиды, матрица растянута вдоль гексагональной оси  $\epsilon_{zz} \approx 0.005$ , а в плоскости  $(xy)$  ее деформации  $\epsilon_{xx}$ ,  $\epsilon_{yy}$  знакопеременны.

Расчет электронных состояний проводился методом модельного псевдопотенциала. Вычисленные зонные энергии идеальных кристаллов  $w$ -GaN и  $w$ -AlN согласуются с экспериментом и другими расчетами. В зоне проводимости обоих кристаллов на линии L-M ( $U$ ) существует боковая долина  $U$ , экстремум которой отстоит от точки M примерно на  $2/3$  расстояния L-M, что соответствует положению точек  $\underline{X}$  и  $\underline{L}$  структуры цинковой обманки. Дно долины  $U_1^c$  в  $w$ -AlN расположено на 0.66 эВ выше дна зоны проводимости  $\Gamma_1^c$ . В  $w$ -GaN экстремуму боковой долины отвечает состояние  $U_3^c$  с энергией на 1.82 эВ большей энергии долины  $\Gamma_1^c$ . При расчете электронных состояний квантовых точек использовалось приближение однородного поля деформации, в котором матрица одинаково расширена во всех направлениях ( $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} \approx 0.01$ ), а квантовые точки сжаты  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \approx -0.016$ ,  $\epsilon_{zz} \approx -0.03$ . Погрешности зонных уровней за счет такого приближения не превышают 0.1 эВ.

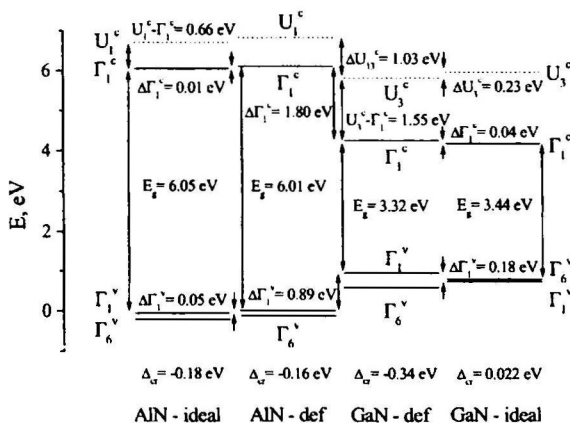


Рис.19. Разрывы зон на границе  $w\text{-AlN}/\text{GaN}(0001)$ . Энергии отсчитаны от потолка валентной зоны идеального  $w\text{-AlN}$ . Точечной линией показано положение уровня нижнего состояния  $U^c$  долины.

размерного квантования будет отвечать локализованному состоянию в квантовой  $\Gamma$  яме GaN, а следующий уровень – состоянию, локализованному в квантовой  $U$  яме GaN. Анизотропное сжатие  $w\text{-GaN}$  сдвигает вверх уровни  $\Gamma_1^c$ ,  $\Gamma_1^v$ , но понижает уровни  $U_3^c$ ,  $\Gamma_6^v$ . В результате в деформированном  $w\text{-GaN}_{\text{def}}$  расстояние между уровнями  $\Gamma_1^c$  и  $U_3^c$

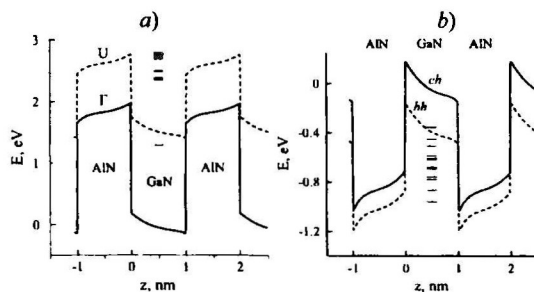


Рис.20. а) Края зоны проводимости  $\Gamma_1^c$  и  $U^c$  вдоль направления (0001), проходящего через центр пирамиды ( $x=y=0$ ). Энергии отсчитаны от края зоны проводимости  $\Gamma_1^c$  деформированного  $w\text{-GaN}$ . б) Край дырочной зоны  $ch$ , отщепленной кристаллическим полем ( $\Gamma_1^v$ , сплошная линия), и зоны тяжелых дырок  $hh$  ( $\Gamma_6^v$ , пунктирная линия) вдоль направления (0001), проходящего через центр основания пирамиды ( $x=y=0$ ). Энергии отсчитаны от потолка валентной зоны  $\Gamma_1^v$  деформированного  $w\text{-GaN}$ .

гексагональной оси с учетом вклада от внутренних полей даны на рис.20. Здесь же показано положение уровней размерного квантования. Внутренние поля приводят к изменению потенциала на величину  $\sim 0.3$  эВ, малую по сравнению с разрывом зон

Вычисленные с учетом деформаций разрывы зон на границе  $w\text{-GaN}/\text{AlN}(0001)$  и другие параметры спектра показаны на рис.19. Разрыв зоны проводимости  $\Delta\Gamma_1^c = 1.80$  эВ близок к экспериментальному значению 1.75 эВ. Кристалл  $w\text{-GaN}$  выступает квантовой ямой для электронов из долин  $\Gamma_1^c$ ,  $U_3^c$ ,  $\Gamma_3^c$  зоны проводимости и дырок из  $\Gamma_1^v$ ,  $\Gamma_6^v$  долин валентной зоны. Взаимное расположение центральной  $\Gamma$  и боковых  $U$  долин на границе  $w\text{-GaN}/\text{AlN}$  показывает, что в СР с малыми КТ возможен случай, когда нижний уровень

уменьшается, а кристаллическое расщепление меняет знак и увеличивается. Изотропное расширение  $w\text{-AlN}$  сдвигает все уровни вверх, кристаллическое расщепление несколько уменьшается. Такие сдвиги уровней делают квантовые ямы  $\Gamma_1^c$  и  $\Gamma_6^v$  более мелкими, а квантовые ямы  $U_3^c$  и  $\Gamma_1^v$  – более глубокими. Встроенные поля, вызванные спонтанной и пьезоэлектрической поляризацией, достигают максимального значения  $\sim 7$  МВ/см вблизи гетерограницы. Пьезоэффект дает больший вклад в суммарное поле, чем спонтанная поляризация. Профили эффективных потенциалов электронов и дырок в направлении

проводимости, но сопоставимую с разрывом валентных зон. Из анализа волновых функций КТ установлено их происхождение из состояний  $w\text{-AlN}_{\text{def}}$ .

Нижнее электронное состояние КТ с симметрией  $\Gamma_1$  и энергией 1.267 эВ (без учета внутренних полей) в основном построено из  $\Gamma_1$  состояния зоны проводимости  $\text{AlN}_{\text{def}}$ . Однако за счет смешивания волновых функций КТ и матрицы Si на гетерогранице в это состояние дают свой вклад и состояния с линий  $0.10\Sigma+0.03\Delta$ . Оно является единственным локализованным состоянием в потенциальной  $\Gamma$ -яме КТ. Его плотность вероятности локализована на атомах азота и распределена примерно равномерно по объему КТ. Второе состояние КТ с симметрией  $\Gamma_1$  ( $E = 2.330$  эВ) является суперпозицией состояний  $\text{AlN}_{\text{def}}$   $0.34\Sigma_1(1/8,1/8,0)+0.34\Sigma_2(1/4,0,0)+0.15\Gamma_1$ . У возбужденного состояния с симметрией  $\Gamma_1$  и энергией 2.716 эВ, происходящего из состояний с линии  $\Delta$ , плотность вероятности локализована на атомах азота, расположенных у вершины пирамиды. Нижние состояния с симметрией  $\Gamma_3$  и близкими энергиями 2.344 эВ, 2.355 эВ происходят из состояний с линий  $U$  и  $\Sigma$ , их плотность вероятности локализована в основном на атомах азота, расположенных сразу над дном КТ.

Внутренние поля сдвигают уровни вверх на величину  $\sim 0.02$  эВ в согласии с распределением электростатического потенциала и электронной плотности.

Верхние дырочные состояния в КТ происходят из состояний тяжелых дырок, несмотря на то, что квантовая яма для них менее глубокая, чем для  $sh$  дырок. Это связано с большим значением эффективной массы тяжелых дырок.

Согласно правилам отбора для света, поляризованного перпендикулярно гексагональной оси ( $e\perp c$ ), разрешенными оптическими переходами являются переходы  $\Gamma_1 \rightarrow \Gamma_3$ ,  $\Gamma_2 \rightarrow \Gamma_3$ ,  $\Gamma_3 \rightarrow \Gamma_3$ , а для света, поляризованного параллельно гексагональной оси ( $e\parallel c$ ), разрешенными являются переходы  $\Gamma_1 \rightarrow \Gamma_1$ ,  $\Gamma_2 \rightarrow \Gamma_2$ ,  $\Gamma_3 \rightarrow \Gamma_3$ .

При расчете коэффициента поглощения наноматериала уровень Ферми располагался над основным, полностью заполненным уровнем CP из КТ  $\Gamma_1$  (1.283 эВ), поэтому поглощение света связано с оптическими переходами с этого уровня в верхние незаполненные состояния CP из КТ. Результаты расчета коэффициента внутризонного поглощения  $\alpha(E)$  даны на рис.21. Для света, поляризованного в базальной плоскости  $e\perp c$ , первый пик коэффициента поглощения при энергии 1.08 эВ связан с переходами с

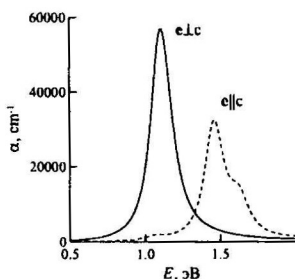


Рис.21. Коэффициент внутризонного поглощения квантовых точек  $w\text{-GaN/AlN}$  в поляризованном свете.

основного уровня CP из КТ с симметрией  $\Gamma_1$  (1.283 эВ) на нижний уровень с симметрией  $\Gamma_3$  (2.367 эВ), а также на второй уровень  $\Gamma_3$  (2.381 эВ). Для света, поляризованного вдоль гексагональной оси  $e\parallel c$ , пики поглощения при энергиях 1.45 эВ и 1.61 эВ возникают за счет переходов с уровня состояния  $\Gamma_1$  (1.283 эВ) на возбужденный уровень с симметрией  $\Gamma_1$  (2.723 эВ), происходящий из состояний линии  $\Delta$ , а также более высокие возбужденные уровни  $\Gamma_1$ , происходящие из состояний плоскости F и линии  $\Delta$  с энергиями 2.880 эВ и 2.891 эВ. Внутренние поля меняют энергии оптических переходов слабо  $\sim 0.01$  эВ. Эти результаты отличаются от спектров поглощения больших пирамидальных КТ, имеющих диаметр основания ( $\sim 6$  нм) и высоту ( $\sim 1.7$  нм вместе со смачивающим слоем), в которых наблюдается пик для поляризации ( $e\parallel z$ ) при энергии 0.8 эВ [20], вызванный внутризонным

переходом из основного  $s$ -состояния в возбужденное  $p_z$  состояние. Оба таких состояния происходят из квантовой  $\Gamma$  ямы GaN. Для поляризации ( $e\perp z$ ) поглощение света слабое, без выраженных пиков. В случае малых КТ имеется только один локализованный уровень в  $\Gamma$  яме GaN. Изучено межзонное поглощение CP из КТ, вызванное переходами электронов из

валентной зоны в зону проводимости. В коэффициенте межзонного поглощения наблюдается обратное соотношение поляризованных пиков – более интенсивно поглощается свет с поляризацией  $e||c$ , что характерно и для края фундаментального поглощения объемного кристалла  $w$ -GaN. Первые пики поглощения с энергиями  $\sim 5$  эВ связаны с оптическими переходами между уровнями размерного квантования КТ. Они существенно сдвинуты в фиолетовую область спектра по сравнению с краем фундаментального поглощения объемного кристалла GaN. Пик поглощения необыкновенной волны при 5.04 эВ обусловлен переходом из валентного состояния КТ  $\Gamma_1$  (0.447 эВ) в состояние зоны проводимости той же симметрии  $\Gamma_1$  (1.267 эВ). Пик поглощения обыкновенной волны при 5.02 эВ обусловлен переходом из вырожденного состояния КТ  $\Gamma_3$  (0.425 эВ) в то же состояние зоны проводимости  $\Gamma_1$  (1.267 эВ). Структуры при энергиях, больших 6 эВ, связаны с межзонными переходами объемных кристаллов.

В пятой главе исследована проблема закрепления уровня Ферми в дефектных материалах. Построена модель глубокого уровня, позволяющая предсказывать свойства облученных кристаллов и оценивать разрывы зон на гетерограницах.

“Дефектные” и “идеальные” модели являются альтернативными точками зрения на природу формирования барьеров в гетероструктурах. “Идеальные” модели опираются на электронные свойства совершенных периодических кристаллов, “дефектные”, напротив, во главу угла ставят свойства несовершенных кристаллов с нарушенной трансляционной симметрией. Тем не менее, их результаты в целом согласуются между собой и с данными эксперимента, что свидетельствует о глубокой внутренней связи между двумя моделями.

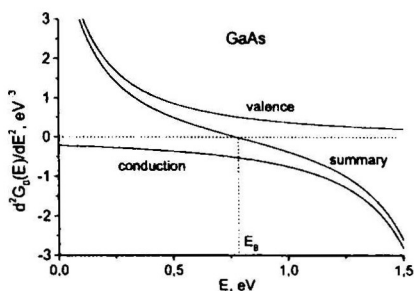


Рис.22. Графическое решение уравнения (1) для GaAs. Показаны парциальные вклады от валентных зон, зон проводимости и их сумма.

использованием модельной функции из условия инвариантности глубокого уровня дефекта в группе соединений получено уравнение

$$2 \sum_{nk} \frac{1}{(E_B - E_{nk})^3} = \frac{\partial^2 G_0(E)}{\partial E^2} \bigg|_{E=E_B} = 0, \quad (1)$$

отвечающее условию максимума нормировочного коэффициента и средней величины матричного элемента дефектного потенциала, а значит, наибольшей локализации волновой функции состояния около дефекта. Поэтому глубокому центру с наиболее локализованной волновой функцией отвечает энергия  $E_B$ , которая слабо зависит от кристаллической матрицы, в которую он внедрен. Графическое решение уравнения (1) на

Для установления этой взаимосвязи был проведен анализ электронных состояний в полупроводниковых гетероструктурах и полупроводниках с точечными и кластерными дефектами. Из расчетов волновых функций глубоких центров следует, что они в основном построены из состояний вблизи экстремумов валентной зоны и зоны проводимости  $\psi_{nk}(r)$  и вследствие сильной локализации около дефектов могут быть представлены в виде модельной функции

$\Phi_E(r) = M \sum_{nk} \psi_{nk}(r) / (E - E_{nk})$ , где  $M$  – нормировочный коэффициент,  $E_{nk}$  – зонный спектр идеального кристалла,  $E$  – энергия глубокого уровня. С

примере GaAs показано на рис.22. Результаты расчета энергий  $E_B$  приведены в табл.2. Для сравнения даны энергии уровней зарядовой электронейтральности в модели Терзоффа  $E_{CNL}$ , предельного уровня Ферми в облученных полупроводниках  $F_{lim}$  и высоты барьера Шоттки  $F_{BS}$  (в основном для контактов с Au и Al). Значения  $E_B$  близки к предельному положению уровня Ферми в облученных полупроводниках  $F_{lim}$  и высотам барьеров Шоттки  $F_{BS}$ . Кроме того, изменение  $E_B$  в ряду материалов подобно соответствующим зависимостям  $F_{BS}$  и  $F_{lim}$ .

Табл.2. Вычисленные энергии запрещенной зоны  $E_g$ , уровня модельного глубокого дефекта  $E_B$  ( $E_B^{abs}$  - относительно уровня вакуума), уровня амфотерного центра  $E_{AC}$ , средне-щелевого уровня  $E_{MG}$  и уровня зарядовой электронейтральности  $E_{CNL}$  [22], экспериментальные значения высоты барьера Шоттки  $F_{BS}$ , предельного положения уровня Ферми в облученных полупроводниках  $F_{lim}$  и потенциала ионизации  $I$ , эВ. Величины  $E_B$ ,  $E_{AC}$ ,  $E_{CNL}$ ,  $E_{MG}$ ,  $F_{lim}$  отсчитаны от потолка валентной зоны  $\Gamma_8^v$ . Символом (\*) помечены значения, полученные при учете 913 специальных точек.

Кристалл	$E_g$	$I$	$E_B$	$E_B^{abs}$	$E_{AC}$	$E_{MG}$	$E_{CNL}$	$F_{lim}$	$F_{BS}$
Si	1.20	5.12	0.47	4.65	0.39	0.37	0.36	0.39	0.32÷0.48
Ge	0.78	4.80	0.26	4.54	0.18	0.06	0.18	0.13	0.07÷0.18
3c-SiC	2.42		1.53		1.40	1.19			1.0÷1.05
BP	1.99		0.95		0.81	0.80			0.87
AlP	2.48	6.02	1.37	4.65	1.20	1.30	1.27		
AlAs	2.24	5.65	1.07	4.58	0.88	1.07	1.05		0.94÷1.04
AlSb	1.60	5.22	0.63	4.59	0.47	0.45	0.45	0.5	0.55÷0.60
GaP	2.37	5.83	1.16	4.67	1.00	1.08	0.81	1.0±0.2	0.94÷1.27
GaAs	1.51	5.47	0.77	4.70	0.63	0.62	0.50	0.6	0.52÷0.82
GaSb	0.87	4.71	0.24	4.47	0.14	0.00	0.07	0.02÷0.05	0.07÷0.10
InP	1.43	5.69	1.03	4.66	0.89	0.90	0.76	1.0	0.76÷0.98
InAs	0.42	5.31	0.53*	4.78*	0.51*	0.50*	0.50	0.52	0.42÷0.47
InSb	0.24	4.77	0.17*	4.60*	0.12*	0.05*	0.01	0.0	0.0÷0.15

Такая корреляция расчетных и экспериментальных данных указывает на то, что положение  $E_B$ ,  $F_{lim}$  и  $F_{BS}$  определяется преимущественно усредненными интегральными характеристиками энергетического спектра кристалла. С использованием экспериментальных значений потенциалов ионизации  $I$  получено положение уровня  $E_B$  относительно уровня „вакуума“  $E_B^{abs} = I - E_B$ . Среднее значение  $E_B^{abs}$  для группы рассмотренных материалов составляет ~4.63 эВ, отклонения от него не превышают 0.15 эВ. Поэтому можно считать, что модельный уровень  $E_B$  выступает единым энергетическим уровнем в группе родственных полупроводников.

Предложенная модель глубокого центра не связана с каким-либо конкретным дефектом кристалла. В ней в развитие модели единого дефекта [21] учитывается лишь один, основной признак глубокого центра - наиболее сильная локализация волновой функции среди возможных дефектов материала. Поскольку глубокое состояние с энергией  $E_B$  формируется из блоховских состояний, отвечающих большим участкам зоны Бриллюэна и многим энергетическим зонам, то его свойства слабо зависят от деталей зонной структуры. Благодаря этому обеспечивается наименьшая чувствительность модельного уровня к конкретному виду материала, ориентации границ в гетеропарах и типу металла в барьерах Шоттки.

Условие непрерывности уровня  $E_B$  на гетерограницах полупроводников позволяет определить разрывы валентных зон  $\Delta E_V$  в гетеропарах  $\Delta E_V = E_B^{(1)} - E_B^{(2)}$ , где  $E_B^{(1)}$  и  $E_B^{(2)}$  -

энергии модельных ГУ в полупроводниках 1 и 2 относительно потолка валентной зоны. Полученные разрывы зон согласуются с экспериментальными данными. Лучшее согласие имеет место для менее напряженных структур.

Модельную функцию можно отнести к амфотерному центру, нейтральность которого обеспечивается компенсацией зарядов, связанных с валентной зоной

$$Z_v = M^2 \sum_{u,k} \frac{1}{(E_{AC} - E_{uk})^2} \text{ и зоной проводимости } Z_c = M^2 \sum_{c,k} \frac{1}{(E_{AC} - E_{ck})^2} ;$$

$$Z_v = Z_c \rightarrow \sum_{u,k} \frac{1}{(E_{AC} - E_{uk})^2} = \sum_{c,k} \frac{1}{(E_{AC} - E_{ck})^2} \quad (2)$$

Результаты расчета уровня амфотерного центра  $E_{AC}$ , выполненные аналогично расчету уровня модельного глубокого дефекта  $E_B$ , даны в табл.2.

В модели Терзоффа [22] энергия уровня электронейтральности  $E_{CNL}$  находится из условия равенства нулю усредненной по элементарной ячейке функции Грина  $G_0(r, r')$  полупроводника

$$G_0(\mathbf{R}, E_{CNL}) = \sum_{n\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}}{(E_{CNL} - E_{n\mathbf{k}})} = 0, \quad (3)$$

где  $\mathbf{R}$  – вектор решетки, перпендикулярный границе металл/полупроводник. В терминах модельной функции это уравнение в пределе  $R \rightarrow \infty$  определяет энергию глубокого уровня из условия асимптотического поведения волновой функции в приближении, когда истинные блоховские функции заменены плоскими волнами. Вычисленные по формуле энергии  $E_{CNL}$  даны в табл.2.

Результаты разных моделей достаточно близки друг к другу. Это связано с тем, что решения уравнений (1-3) находятся вблизи точки перегиба функции Грина, где расположены наиболее локализованные щелевые состояния.

Заменяя энергии  $E_B$  и  $E_{AC}$  на средний уровень в щели  $E_{MG}$ , из уравнений получаем  $E_{MG} - \tilde{E}_v = \tilde{E}_c - E_{MG}$ ;  $E_{MG} = (\tilde{E}_v + \tilde{E}_c)/2$ , что соответствует модели среднещелевого уровня Кардоны и др. [23]. Вычисленные методом спецточек значения  $E_{MG}$  также приведены в табл.2.

Таким образом, анализ модельной функции позволяет объяснить корреляцию результатов разных подходов при описании межфазных границ через усредненные, интегральные характеристики зонного спектра. Это снимает противоречие между моделями, основанными на представлениях о квантовых туннельных состояниях, и “дефектными” моделями. Результаты, полученные в рамках “дефектных” моделей могут быть переформулированы в терминах моделей квантовых туннельных состояний и наоборот. Это находит свое отражение в единстве эмпирических закономерностей, наблюдающихся для барьеров Шоттки, полупроводниковых гетероструктур и глубоких уровней дефектов в полупроводниках.

Установлена корреляция глубоких уровней собственных дефектов с предельным уровнем Ферми в облученных полупроводниках  $\text{As}_2\text{S}_3$ . Из расчета следует, что глубокие уровни наиболее “мощных” дефектов из вакансий анионов в группе однотипных по характеру химической связи соединений III-V имеют практически одинаковое положение относительно уровня вакуума. Среднее значение глубоких уровней вакансий анионов  $\langle E_L(V_A)^{abs} \rangle = 4.51$  эВ близко к средним значениям модельных уровней  $\langle E_{ac}^{abs} \rangle = 4.50$  эВ,  $\langle E_B^{abs} \rangle = 4.63$  эВ и предельных уровней Ферми  $\langle F_{lim}^{abs} \rangle = 4.75$  эВ (относительно уровня вакуума). Поэтому вакансии анионов являются одними из реальных представителей точечных дефектов, которые описываются моделью наиболее глубокого уровня. Усреднение энергий глубоких уровней всей совокупности собственных дефектов  $S_A, A_C, V_C, V_A$  дает средний уровень с энергией  $\langle E_{av}^{abs} \rangle = 4.91$  эВ, относительно которого уровни



пар вакансий и антиструктурных дефектов для каждой подрешетки расположены почти симметрично, так что приблизительно выполняется соотношение  $(E(V_A) + E(C_A))/2 = (E(V_C) + E(A_C))/2 = \langle E_{av}^{abs} \rangle$ , которое можно рассматривать как условие равновесия донорно-акцепторных пар дефектов ( $A_C$ ,  $V_C$ ) и ( $C_A$ ,  $V_A$ ) на двух подрешетках. При сильном радиационном облучении это соотношение вытекает из уравнения электронейтральности при равенстве темпов генерации доноров и акцепторов, поэтому уровень  $\langle E_{av}^{abs} \rangle$  выступает в роли предельного уровня Ферми  $F_{lim}$ . Уровень  $\langle E_{av}^{abs} \rangle$  можно рассматривать и как модельный глубокий уровень, порожденный амфотерным центром, на котором локально выполняется условие электронно – дырочного равновесия, что согласуется с концепцией амфотерного собственного дефекта для бинарных полупроводников [24].

На основе расчета глубоких уровней собственных дефектов показано, что закрепление уровня Ферми в облученном электронами кристалле InAs над дном зоны проводимости и его  $n^-$ -тип проводимости являются результатом взаимной компенсации ансамбля донорных и акцепторных состояний радиационных дефектов, при котором уровень  $F_{lim}$  располагается посередине между уровнями доминирующих по концентрации радиационных дефектов. „Низкое” положение дна зоны проводимости в диэлектрической щели InAs по сравнению с другими полупроводниками группы алмаза и соединениями группы III-V приводит к тому, что часть радиационных дефектов ( $V_{As}$ ,  $In_{As}$ ) формирует состояния резонансного типа в области разрешенных энергий зоны проводимости, которые определяют электрические свойства облученного InAs.

Предложенная модель дает согласующиеся с экспериментом результаты и для кристаллов с другой структурой ( $A_4$ ,  $A_2B_6$ ,  $A_2B_4C_5^2$ ). Показано, что в гексагональном  $h$ -BN и ромбоэдрическом  $r$ -BN нитриде бора благодаря подобию зонных спектров, уровни электронейтральности расположены почти в одном и том же месте запрещенной зоны – ближе к потолку валентной зоны. Это объясняет дырочный тип их проводимости. Микровключения из ромбоэдрической фазы в кристаллитах  $h$ -BN выступают квантовыми ямами для дырок и барьерами для электронов.

**В шестой главе** приведены результаты исследования процессов резонансного туннелирования электронов через квантовые структуры с различной ориентацией границ раздела и направления падения электронов. Построено модельное описание этих процессов с учетом смешивания состояний на гетерограницах.

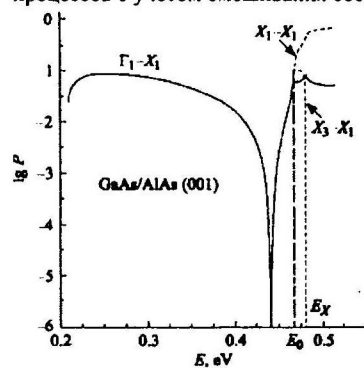


Рис.23. Коэффициент прохождения электронов  $P(E)$  через границу GaAs/AlAs (001) из  $\Gamma_1$ ,  $X_1$  и  $X_3$  долин GaAs в  $X_1$  долину AlAs. Энергия  $E_0 = 0.4672$  эВ отвечает дну двугорбой структуры GaAs.

*Рассеяние электронов на одной границе GaAs/AlAs(001).*

На рис.23 приведен коэффициент прохождения электронов  $P(E)$  из  $\Gamma$  и  $X$  долин GaAs в  $X_1$  долину AlAs через резкую границу GaAs/AlAs (001). Символом  $X_1$  обозначено состояние из окрестности двугорбой структуры GaAs с меньшим волновым вектором, символом  $X_3$  – состояние с большим волновым вектором. Максимальному отражению электронов от границы отвечает провал  $P(E)$  при энергии  $E_d = 0.441$  эВ (*deep* состояние). Анализ волновой функции *deep*-состояния показывает, что у нее имеется лишь небольшой всплеск амплитуды вблизи гетерограницы, поэтому *deep*-состояния вряд ли могут считаться интерфейсными состояниями. Для выяснения природы *deep*-состояний была построена диаграмма Арганда – зависимость реальной части элемента матрицы рассеяния  $S_{11}$  от ее мнимой части для элемента матрицы рассеяния  $(S_{11})_{X\Gamma}$ , связывающего

амплитуды прошедшей  $X_1$  и налетающей  $\Gamma_1$  волн. На этой диаграмме  $S_{11}$  является вектором, эволюция которого ограничена кругом единичного радиуса. Вблизи резонансов этот вектор испытывает наибольшие изменения, что удобно для моделирования матрицы рассеяния. При наличии у структуры изолированного резонансного состояния диаграмма Арганда должна представлять собой круг, параметры которого связаны с положением полюса матрицы рассеяния в комплексной области энергии.

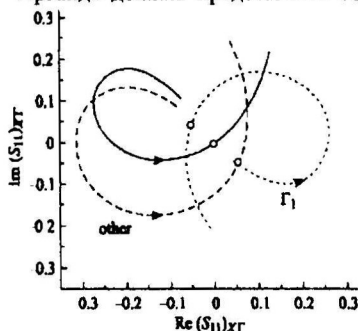


Рис.24. Диаграмма Арганда для элемента матрицы рассеяния  $(S_{11})_{\Gamma\Gamma}$  в интервале энергии  $E_x(\text{AlAs}) < E < E_0(\text{GaAs})$  (сплошная линия). Стрелкой показано направление роста энергии. Пунктирными линиями обозначены вклады от "виртуальных" процессов (уменьшены в 5 раз), связанных с  $\Gamma_1$  волной и всеми другими волнами (other). Кружки отвечают значениям  $(S_{11})_{\Gamma\Gamma}$  при энергии  $E_d$ .

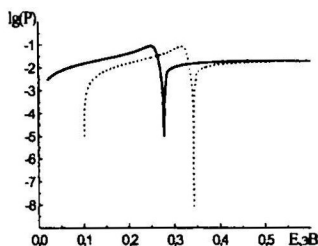


Рис.25. Коэффициент прохождения электронов из  $\Gamma$ -долины GaAs через барьер

$\text{AlAs}(2\sqrt{3}a)$  при нормальном (сплошная линия) и наклонном ( $k_{\parallel}=0.03\sqrt{2}2\pi/a$ , пунктирная линия) падении электронов.

Расчет матрицы рассеяния в области комплексных энергий подтверждает, что вблизи вещественной оси энергии у нее такого полюса нет. Прохождение электронной волны через границу можно рассматривать как результат взаимодействия различных "виртуальных" процессов. Анализ матрицы рассеяния показывает, что налетающая  $\Gamma_1$  волна сначала преобразуется в отраженные волны в GaAs, которые затем преобразуются в прошедшую  $X_1$  волну. Основную роль играют состояния отраженных  $\Gamma_1$ ,  $X_1$  и  $X_3$  волн. На рис.24 показаны парциальные вклады от  $\Gamma$  волны и всех остальных отраженных волн в GaAs.

Видно, что суммарная амплитуда  $(S_{11})_{\Gamma\Gamma}$  является результатом компенсации этих вкладов. В результате такой компенсации в среде, в которую электрон проходит с энергией  $E_d$ , формируется затухающее состояние, описываемое вещественной функцией, а в среде, из которой электрон налетает на границу, из падающей и отраженной бегущих волн формируется стоячая волна с равными модулями коэффициентов при двух  $X$ -волнах, одинаковым образом затухающих вглубь GaAs. Возникновение деструктивной интерференции налетающей  $\Gamma_1$  и отраженной  $\Gamma_1$  волн в области GaAs обеспечивается наличием двугорбой структуры в GaAs и определенным сочетанием параметров зонного спектра обоих материалов, прежде всего величиной параметров  $\Gamma$ - $X$  и  $X$ - $X$  смешивания на границе.

Структуры GaAs/AlAs с гетерограницей (111). Интерфейсные резонансные состояния возникают в структурах GaAs/AlAs с резкой гетерограницей (111). На рис.25 приведен коэффициент прохождения  $P(E)$  электронов из  $\Gamma$  долины GaAs

через барьер  $\text{AlAs}(2d)$ ,  $d=\sqrt{3}a$ . При энергиях, несколько меньших дна  $L$  долины GaAs, наблюдается почти полное отражение  $\Gamma$  волны с энергией  $E_d$  (deep - состояние). При наклонном падении электронов на границу провал в  $P(E)$  сдвигается в сторону больших энергий в соответствии с изменениями комплексной зонной структуры. В окрестности  $L$  долины GaAs коэффициент прохождения имеет асимметричную,



нелоренцевую форму. Найдено, что расчет  $P(E)$ , в котором учитывались взаимодействия между всеми распространяющимися (незатухающими) состояниями и состояниями с наименьшими декрементами затухания из  $\Gamma_1$  и  $L_1$  долин зоны проводимости, дает результаты, близкие к точному многозонному расчету. Это позволило построить двухдолинную  $\Gamma$ - $L_1$  модель электронных процессов в структурах GaAs/AlAs(111) и выяснить природу *deep*-состояния.

Согласно модели отношение амплитуды  $\tilde{A}$  огибающей волновой функции при затухающей  $\Gamma$  волне в AlAs к амплитуде  $A$  падающей  $\Gamma$  волны в GaAs для одной границы имеет вид

$$\frac{\tilde{A}}{A} = \alpha \frac{a_1 - \sqrt{E_{L_1} - E}}{b_1 - \sqrt{E_{L_1} - E} + ic_1} \quad (4)$$

где  $\alpha$  - комплексная величина;  $a_1, b_1, c_1$  - вещественные величины,  $E_{L_1}$  - энергия дна  $L_1$  долины в GaAs,  $E$  - энергия налетающего электрона. Параметры модели определены из данных псевдопотенциального расчета. Появление корневой зависимости от энергии в формуле (4) аналогично ее введению при исследовании рассеяния медленных частиц на квазидискретном уровне в центральносимметричном поле [25]. Если отвлечься от линейной энергетической зависимости входящих в (4) величин, то эта формула отличается от приведенной в [25] наличием коэффициента  $c_1$ , который определяет появление значительной мнимой компоненты энергии в полюсе матрицы рассеяния и, следовательно, малое время жизни соответствующего квазидискретного уровня за счет сильного  $\Gamma$ - $L$  смешивания на гетерогранице. Поэтому отношение  $|\tilde{A}/A|^2$  как функция энергии имеет слабо выраженный максимум, однако ноль этой величины проявляется довольно резко.

Особенности в энергетической зависимости  $|\tilde{A}/A|^2$  обнаруживают себя в коэффициенте прохождения электронов через однобарьерную структуру. В этом случае отношение амплитуды прошедшей к амплитуде налетающей  $\Gamma$ - волны описывается формулой типа (4), но с элементами другой матрицы, учитывающей рассеяние электронов на двух границах (амплитуда  $\tilde{A}$  отвечает прошедшей  $\Gamma$ -волне в GaAs). Сильное затухание  $L$ - электронных состояний в слое AlAs приводит к тому, что при толщинах барьера порядка  $a\sqrt{3}$  и энергии  $E_d$ , для которой  $\tilde{A} = 0$  в случае одной границы, электронная волна ведет себя так, как будто, второй границы нет. Поэтому ноль коэффициента прохождения через однобарьерную и двухбарьерную структуры наблюдаются при одной и той же энергии. Для дальнейшего анализа *deep*-состояния параметры двухдолинной  $\Gamma$ - $L$  модели  $\alpha, a_1, b_1, c_1$  были выражены через характерные особенности  $P(E) = |\tilde{A}/A|^2$ : максимум

$$P_{\max} \text{ при } E=E_1, \frac{\partial(P(E))}{\partial E} \Big|_{E=E_1} = 0, \text{ ноль при } E=E_0, a_1 - \sqrt{E_{L_1} - E_0} = 0 \text{ и значение } P(E_{L_1})$$

в экстремуме  $L_1$  - долины GaAs. Положение полюса в нижней полуплоскости комплексной энергии  $E=E_p - i\gamma$ ,  $\gamma > 0$  определяется из уравнения  $b_1 - \sqrt{E_{L_1} - (E_p - i\gamma)} + ic_1 = 0$ .

С использованием такой параметризации для  $\Gamma$ - $\Gamma$  канала рассеяния был рассчитан модуль элемента подматрицы рассеяния  $|S_{11}|$  для одной границы (рис.26) и коэффициент прохождения для одного барьера (рис.27). Результаты показывают, что при энергиях  $E > E_1$  формула (4) дает практически полное совпадение с многозонным расчетом. Параметры, характеризующие положение полюсов для границы и барьера, получились близкими ( $E_p = 0.2593$  эВ,  $\gamma = 0.0149$  эВ) и ( $E_p = 0.2606$  эВ,  $\gamma = 0.0152$  эВ) соответственно. Из-за больших

значений мнимой части энергии времени жизни резонансных состояний ( $\tau = \hbar/2\gamma$ ) очень малы ( $\sim 20$  фс), а максимум  $P(E)$  слабо выражен. При энергиях  $E < E_1$  по мере приближения к дну Г-долины GaAs расхождение между точным и модельным расчетами возрастает.

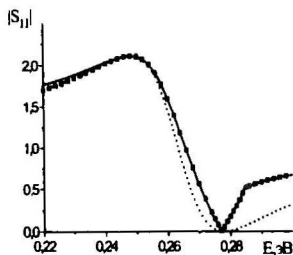


Рис.26. Модуль элемента подматрицы рассеяния  $S_{11}$  для одной границы (Г-Г канал): символами (■) обозначены результаты многозонного расчета, сплошная линия — расчет с использованием формулы (4), пунктирная линия — расчет по формуле (5).

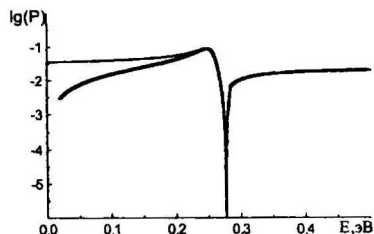


Рис.27. Коэффициент прохождения электронов через один барьер  $\text{AlAs}(2\sqrt{3}a)$  (Г-Г канал). Толстая линия — расчет с использованием формулы (4), тонкая линия — расчет по формуле (5).

Увеличение времени распада проявляется в возникновении более резкого максимума коэффициента прохождения.

*Туннелирование электронов в структурах GaAs/AlAs с плавным потенциалом на гетерогранице.* Изучено влияние ПП на процессы туннелирования. Профиль интерфейсного потенциала получался из расчета потенциалов достаточно толстых сверхрешеток  $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_m$ . Найдено, что при числе монослоев  $m \geq 8$  потенциал вблизи идеальной геометрической границы из среднего слоя атомов  $\text{As}_{av}$ , окруженных двумя атомами Ga и двумя атомами Al, практически не меняется с ростом  $m$ . Поэтому потенциал сверхрешетки  $(\text{GaAs})_8(\text{AlAs})_8$  в этой области можно рассматривать как реальный

Это обусловлено тем, что в выражении (4) не учтена энергетическая зависимость параметров, связанных с состояниями из Г-долины.

Вдали от экстремума  $E_L$  корневую зависимость волнового вектора от энергии можно аппроксимировать линейной функцией, тогда (4) переходит в формулу

$$\tilde{A}/A = \beta \frac{E - E_0}{E - (E_p - i\gamma)}, \quad (5)$$

которая ранее использовалась для описания вероятностей туннелирования и времен жизни электронов в квантовых волноводах со связанными резонансами. Эта формула приводит к сечению рассеяния, полученному Фано для резонансных состояний в атомах и молекулах. Однако вблизи экстремумов долин формула (5) становится несправедливой, излом на кривой  $P(E)$  не воспроизводится. Это видно из рис.8, где для сравнения показан результат подгонки с использованием формулы (5) с параметром уширения  $\gamma=0.015$  эВ. Поэтому выражение (4) позволяет установить более точные значения параметров Г-L связи на гетерогранице (111). Для состояний, близких по энергии к нулю функции  $P(E)$ , характерна локализация электронной плотности вблизи гетерограницы GaAs(111B)/AlAs(111A). Наибольший вклад в нее вносят затухающие в обе стороны от границы L состояния обоих материалов. За счет Г-L смешивания формируется гибридное состояние, имеющее максимум амплитуды вблизи гетерограницы, что и дает основание говорить о нем как об “интерфейсном” состоянии. В случае двухбарьерной структуры “интерфейсные” состояния имеют большое время распада, поскольку Г- волна не уходит на бесконечность, а оказывается запертой в квантовой яме.

интерфейсный потенциал  $V_r$ . Переходная область, в которой кристаллический потенциал GaAs непрерывно переходит в кристаллический потенциал AlAs, ограничена в основном пределами одного монослоя с каждой стороны от такой (резкой) границы, что позволяет моделировать интерфейсный потенциал с помощью потенциалов более тонких сверхрешеток.

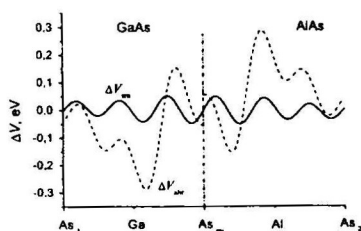


Рис. 28. Усредненные в плоскости границы разности плавного (smooth) кристаллического потенциала  $V_{sm}$  с потенциалом сверхрешетки  $(GaAs)_2(AlAs)_2$   $\Delta V_{sm} = V_r - V_{sm}$  (сплошная линия) и резко-оборванным (abrupt) потенциалом  $\Delta V_{abr} = V_r - V_{abr}$  (пунктирная линия). Вертикальной линией обозначено положение резкой границы на атомах  $As_{av}$ .

Потенциал структуры GaAs/AlAs представлялся как составной из потенциалов GaAs, сверхрешетки  $(GaAs)_2(AlAs)_2$  и AlAs. В этом случае переходная область составляет половину периода CP. Ее две "плавные" границы расположены на слоях из атомов  $As_1$  и  $As_2$ , являющихся общими с кристаллами GaAs и AlAs соответственно. Использование такого переходного слоя позволяет описать реальный потенциал вблизи гетерограницы GaAs/AlAs(001) с точностью не хуже 0.05 эВ (рис. 28). В стандартной модели с одной резкой границей расхождения с ПП почти на порядок больше, максимальные отличия, наблюдаемые вблизи атомов Ga и Al, достигают величины ~ 0.3 эВ. На рис. 29 приведена схема разрывов зон GaAs/AlAs(4a)/GaAs(8a)/AlAs(4a)/GaAs(001) в моделях с плавной и резкой границами. В

модели с РП гетерограница выбрана в положении атомов мышьяка. За счет смешивания  $\Gamma$  и  $X_2$  состояний не только на гетерограницах, как в модели с разрывным на одной границе потенциалом, но и в переходной области CP, соединение линий, отвечающих состояниям бинарных соединений и CP, носит, вообще говоря, условный характер. Для электрона, налетающего из GaAs, сверхрешетка выступает как наложенные друг на друга барьеры (ямы) с разными высотами (глубинами) и эффективными массами из  $\Gamma_1^{(1)}$ ,  $\Gamma_1^{(2)}$ ,  $Z_1$  и  $Z_3$  - долин, с которыми электрон взаимодействует одновременно, но с разными вероятностями, пропорциональными весам состояний из  $\Gamma_1$  и  $X_1$  долин в волновой функции CP. Более того, при использовании сверхрешетки  $(GaAs)_2(AlAs)_2$  в переходной области помимо  $\Gamma$ - $X$  смешивания имеет место также  $\Gamma$ - $\Delta$  и  $X$ - $\Delta$  смешивание, поскольку в волновые функции CP с волновым вектором  $k = 0$  дополнительный вклад вносят сферические состояния с середины линии  $\Delta$  зоны Бриллюэна ГЦК решетки. На рис. 29 экстремумы зон соединены с учетом того обстоятельства, что состояния зоны проводимости сверхрешетки  $\Gamma_1^{(1)}$  и  $\Gamma_1^{(2)}$  построены преимущественно из сферических  $X_1$  и  $\Gamma_1$  состояний соответственно.

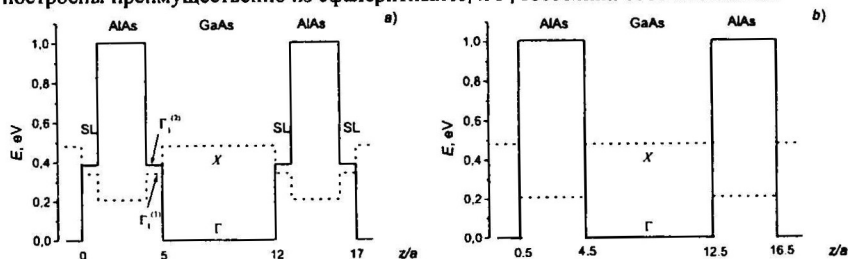


Рис. 29. Разрывы зоны проводимости в двухбарьерной структуре GaAs/AlAs(4a)/GaAs(8a)/AlAs(4a)/GaAs: а) в модели с переходным слоем из половины периода сверхрешетки  $(GaAs)_2(AlAs)_2(001)$ , б) в модели с РП.

Туннелирование электронов через одну границу. Результаты расчета коэффициента прохождения  $P(E)$  электронов из  $\Gamma$  - долины GaAs через гетерограницу GaAs/AlAs(001) приведены на рис.30. Учет ПП приводит к существенным изменениям. Наиболее чувствительным к точному профилю потенциала и параметрам матрицы сшивания оказался провал коэффициента прохождения  $P(E_d=0)$ , положение которого ( $E_d = 0.38$  эВ) сдвинулось под дно второй зоны проводимости сверхрешетки  $\Gamma_1^{(2)}$ .

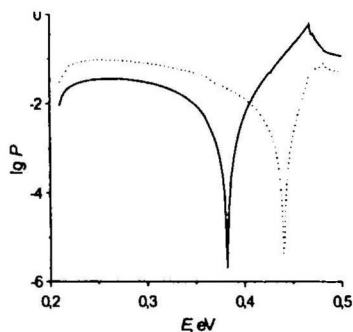


Рис.30. Коэффициент прохождения электронов  $P(E)$  из  $\Gamma$  долины GaAs в  $X$  долину AlAs через одну гетерограницу GaAs/AlAs(001) с ПП (сплошная линия) и РП (пунктирная линия).

приведен на рис.31. Во всей области энергии наблюдаются заметные различия с результатами расчета с РП. В терминах параметров метода эффективной массы они связаны с изменением профиля зон, значений масс и констант междолинной связи на границах. В низкоэнергетической области ( $E < 0.3$  эВ), учет ПП делает барьер примерно на 20% прозрачнее, в основном, вследствие меньшего декремента затухания  $\Gamma_1$  волны в СР по сравнению с AlAs.

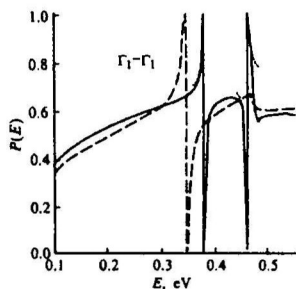


Рис.31. Коэффициент прохождения электронов через барьер AlAs(a). Сплошные линии - расчет с ПП, крупная пунктирная линия - расчет с РП, мелкая пунктирная линия - расчет с использованием формулы (5).

Амплитуды этих состояний соотносятся как 7:3:3, поэтому нижний резонанс является гибридным состоянием и его лишь приблизительно можно рассматривать как квазистационарное состояние в  $\Gamma_1^{(1)}$  яме. В отличие от первого резонанса, минимум второго Фано-резонанса не достигает точно нулевого значения. Неполная деструктивная и неполная конструктивная интерференции волн связаны с влиянием других зон. Вблизи

Туннелирование электронов через один барьер. Коэффициент прохождения электронов из  $\Gamma$  долины GaAs ( $\Gamma_1$ - $\Gamma_1$  канал) через барьер AlAs(a)

более существенные отличия обнаруживаются в области перекрытия профилей разных долин, где возникают Фано-резонансы, соответствующие квазистационарным состояниям в  $X$  - яме AlAs или  $\Gamma_1$  - ямах в СР. Эти отличия связаны с особенностями поведения поправки  $\Delta V$  к РП, которая в областях между атомами  $As_{av}$  и  $As_1$  в среднем понижает высоту барьера, а в области между атомами  $As_{av}$  - поднимает дно ямы, что приводит к увеличению энергии нижнего состояния в  $X$  - яме AlAs и проваливанию надъямного уровня, расположенного при энергии 0.4818 эВ в расчете с РП, под экстремум двугорбой структуры GaAs. Анализ волновой функции показал, что состояние нижнего Фано-резонанса в области барьера построено из трех состояний, происходящих из  $\Gamma_1^{(1)}$  (распространяющееся состояние),  $\Gamma_1^{(2)}$  (состояние с малой величиной  $\text{Im}(k_z)$ ) и  $\Gamma_1^{(1)}$  (состояние с большой величиной  $\text{Im}(k_z)$ ) долин сверхрешетки.

второго Фано-резонанса имеются три взаимодействующих состояния, происходящие из  $\Gamma_1^{(3)}$  (распространяющееся),  $Z_3$  (с малой мнимой частью проекции волнового вектора  $\text{Im}(k_z)$ ) и  $\Gamma_1^{(1)}$  (с большой мнимой частью  $\text{Im}(k_z)$ ) долин сверхрешетки. В волновой функции гетероструктуры амплитуды у второго состояния наибольшие, поэтому электрон туннелирует через барьер, в основном по щелевому состоянию, возникшему в результате расщепления зонного спектра СР на границе зоны Бриллюэна. В модели с РП электрон при тех же энергиях туннелирует в основном по  $\Gamma_1$  состоянию AlAs. Эффективное увеличение размера потенциальной X - ямы при учете ПП приводит к росту в области AlAs плотности вероятности состояний, соответствующих пикам ( $E_{\text{max}}$ ) и провалам ( $E_{\text{min}}$ ) Фано-резонансов (рис.32).

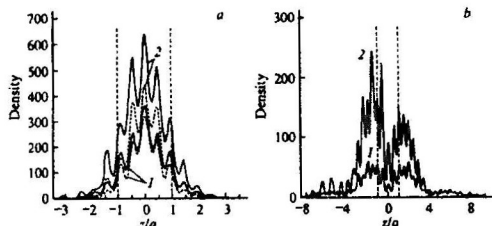


Рис.32. Усредненная в плоскости гетерограницы плотность вероятности для состояний вблизи а) первого и б) второго Фано-резонансов. Сплошные линии - расчет с ПП, пунктирные - расчет в модели с РП. Линии с номером 1 относятся к состояниям, соответствующим пикам резонансов, а помеченные цифрой 2 - к состояниям, соответствующим провалам резонансов. Вертикальными штриховыми линиями показаны границы периода сверхрешетки.

в диаграмме Арганда для элемента матрицы рассеяния  $S_{11}$  (канал рассеяния  $\Gamma_1-\Gamma_1$ ). Из рис.33 видно, что «траектории»  $S_{11}$  около обоих Фано-резонансов в большей своей части представляют из себя окружности, параметры которых связаны с нулями и полюсами

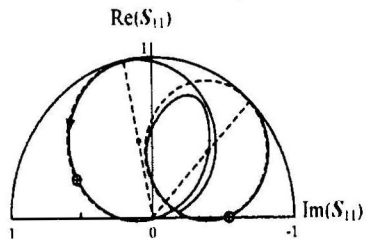


Рис.33. Диаграмма Арганда для элемента матрицы рассеяния  $(S_{11})_{\Gamma_1\Gamma_1}$ . Стрелкой показано направление роста энергии, маленькие кружки - положения реальных частей энергий полюсов  $E_p$ . Пунктирные линии построены по формуле (6), крестиками обозначены центры окружностей.

Для нижних Фано-резонансов плотность максимальна в области барьера, а в сторону GaAs она экспоненциально (с декрементом, соответствующим  $\text{Im}(k_z)$   $X_1$  - долины GaAs) переходит в осциллирующую суперпозицию налетающей и отраженной волн (слева) или в осциллирующую прошедшую волну (справа). У состояний с энергиями  $E_{\text{min}}$  функция ограничена в одном направлении, что приводит к росту плотности в области AlAs. Плотность вероятности у состояний, отвечающих второму резонансу, менее локализована в области квантовой ямы (р-подобный вид) и в основном находится за пределами барьера.

Ноль-пиковая природа Фано-резонансов наглядно проявляется в матрицы рассеяния в комплексной области энергии. Поскольку резонансы расположены достаточно далеко друг от друга по энергии, то их «взаимодействие» можно пренебречь и в окрестности каждого каноническое разложение матрицы рассеяния представить в виде, подобном (5)

$$S_{11}(E) \approx S_{\text{pot}} + A/(E - E_p) = B \frac{(E - E_n)}{(E - E_p)}, \quad (6)$$

где  $S_{\text{pot}}$  - описывает потенциальное, слабо зависящее от энергии рассеяние,  $E_p = E_r - i\Gamma$  - энергия полюса ( $\Gamma > 0$ ),  $E_n = E_0 - i\gamma$  - энергия нуля элемента матрицы рассеяния в комплексной плоскости энергии,  $B$  - комплексное число. Параметры формулы (6) определялись из результатов точного расчета - минимального  $P(E_{\text{min}})$  и максимального значений  $P(E_{\text{max}}) = 1$

коэффициента прохождения в области Фано-резонанса и экстремумов фазового времени задержки [26]  $\tau(E) = \hbar \frac{\partial \Theta(E)}{\partial E}$  ( $\Theta(E)$  - сдвиг фазы элемента матрицы  $S_{11}$ ) при энергиях  $E_r$  и  $E_0$ . Найденные значения параметров для нижнего Фано-резонанса равны:  $E_r = 0.3793(0.3459)$  эВ,  $\Gamma = 0.00085(0.00246)$  эВ,  $\tau(E_r) = 0.387(0.134)$  пс,  $E_{\min} = E_0 = 0.3799(0.348)$  эВ,  $E_{\max} = 0.3781(0.343)$  эВ,  $\gamma = 0$ . В скобках даны значения, полученные в модели с разрывным потенциалом. Из сравнения следует, что учет ПП увеличивает время столкновения электрона с барьером в области первого Фано-резонанса почти в 3 раза. Это изменение связано с уменьшением константы междолинной ( $\Gamma_1 - \Gamma_1^{(1)}$ ) связи на границе GaAs/Ga<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>As<sub>4</sub>  $|(I_{11})_{\Gamma_1 \Gamma_1^{(1)}}| = 0.03$  по сравнению с константой ( $\Gamma_1 - X_1$ ) связи для резкой границы GaAs/AlAs  $|(I_{11})_{\Gamma_1 X_1}| = 0.05$ . Здесь  $(I_{11})_{\nu\nu'}$  - элементы матрицы перехода на левой границе. Для второго Фано-резонанса параметры равны:  $E_r = 0.4605$  эВ,  $\Gamma = 0.00126$  эВ,  $\tau(E_r) = 0.261$  пс,  $E_0 = 0.45975$  эВ,  $E_{\max} = 0.4626$  эВ,  $\gamma = -0.00022$  эВ. Поскольку  $\gamma$  мало, то  $E_{\min} \approx E_0$ , а траектория  $S_{11}$  на диаграмме, как следует из (6), близка к окружности.

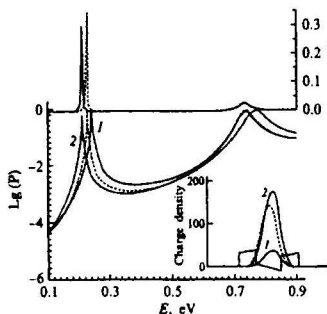


Рис.34. Коэффициент прохождения  $P(E)$  и фазовое время  $\tau(E)$  электронов через двухбарьерную структуру  $w$ -GaN/GaN(3c)/GaN(4c)/GaN(3c)/GaN. Сплошная линия 1 и пунктирная линия – результаты многозонного расчета и расчета в однодолинной модели без учета электрических полей соответственно. Сплошная линия 2 – расчет в однодолинной модели с учетом внутренних электрических полей. На вставке показан потенциал и плотности вероятности резонансных состояний. Пунктирная линия отвечает расчету без полей, сплошные линии 1 и 2 – расчетам с внутренними полями при падении электронов слева и справа соответственно.

Аналогичный анализ проведен для процессов рассеяния электронов на плавных границах в структурах GaAs/AlAs(111). Показано, что учет ПП в таких структурах приводит к более сильным изменениям  $L$  – резонансов по сравнению с X-резонансами в структурах с границей (001), что связано с большей амплитудой потенциала возмущения  $\Delta V_{\text{abr}}$  и меньшими значениями эффективных масс электронов в  $L$  – долинах. Влияние ПП выразилось в: 1) исчезновении интерфейсных состояний на одной границе GaAs/AlAs (111), 2) ослаблении  $\Gamma$ - $L$  смешивания на границах, сужении Фано-резонансов, 3) сдвигах нижних резонансов, достигающих  $\sim 0.1$  эВ для слоев тоньше 2 нм.

#### Туннелирование электронов в напряженных нитридных структурах $w$ -GaN/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N

Рассмотрены вюртцитные структуры GaN/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N(0001) с тонкими барьерами из твердого раствора, постоянная решетки которого в плоскости границы согласовывалась с постоянной решетки GaN. Деформация слоев Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N вызывает пьезоэлектрическую поляризацию. Полная поляризация в барьере  $P_b = -0.057$  Кл/м<sup>2</sup>. В квантовой яме GaN имеется только спонтанная поляризация  $P_w = -0.029$  Кл/м<sup>2</sup>. Электрические поля в слоях определялись из условия непрерывности нормальной составляющей индукции и условия компенсации однородной составляющей поля в структуре. Использовался разрыв зоны проводимости  $\Delta E_c(\text{GaN/Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}) = 0.81$  эВ. Вычисленный коэффициент прохождения электронов через двухбарьерную структуру

GaN/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N(3c)/GaN(4c)/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>N(3c)/GaN приведен на рис.34. Результаты многозонного расчета получены без учета внутренних полей. Двум пикам в  $P(E)$  отвечают резонансные состояния в яме.

При этих же условиях проведен приближенный расчет, в котором в матрице сшивания учитывались "взаимодействия" только между  $\Gamma$  состояниями нижней зоны проводимости.

При энергиях электронов до  $\sim 2$  эВ от дна ямы результаты двух расчетов практически одинаковые, что связано со слабым влиянием на волновую функцию гетероструктуры состояний из высших зон, имеющих большие декременты затухания. Это стало основанием для применения в данной области энергии метода эффективной массы, в котором учитывались состояния с симметрией  $\Gamma_1$ . Вычисленный в этой модели коэффициент прохождения согласуется с результатами многозонного расчета (рис.34). Некоторое отличие в энергиях нижнего резонанса ( $\sim 0.02$  эВ) связано с влиянием состояний валентной зоны. С ростом концентрации алюминия в барьерных слоях энергия резонанса приближается к точке ветвления комплексной зонной структуры твердого раствора и расхождение с точным расчетом увеличивается. При небольшой концентрации Al однодолинная модель справедлива. Она была применена для анализа влияния внутренних полей на тунелирование электронов в структурах  $w\text{-GaN/Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}(0001)$ .

Вычисленные с учетом внутренних полей коэффициент прохождения, фазовое время прохождения  $\tau = \hbar \partial \varphi(E) / \partial E$  ( $\varphi(E)$ - сдвиг фазы амплитуды прошедшей волны), профиль эффективного электронного потенциала и плотность вероятности также показаны на рис.34. Внутреннее поле в барьерных областях направлено от катиона к ближайшему аниону вдоль гексагональной оси ( $E_b = 1.31 \cdot 10^6$  В/см), в области ямы – в противоположном направлении ( $E_w = -1.92 \cdot 10^6$  В/см). Основной вклад в значения этих полей связан со спонтанной поляризацией. Внутренние поля меняют электронный потенциал в слоях на величины, сравнимые с разрывами зон, и делают его несимметричным. Вследствие этого локализация зарядовой плотности в яме зависит от направления падения электрона, а вероятность тунелирования, энергия нижнего резонанса и фазовое время уменьшаются.

С ростом концентрации Al в барьерах эти эффекты усиливаются. Существование полярного направления в вюртцитных кристаллах приводит к зависимости коэффициента прохождения от взаимного расположения барьеров в несимметричных структурах  $w\text{-GaN/Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}(4c)/\text{GaN}(4c)/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}(3c)/\text{GaN}(0001)$  и  $w\text{-GaN/Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}(3c)/\text{GaN}(4c)/\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N}(4c)/\text{GaN}(0001)$ . Напряженности внутренних полей в однотипных слоях этих структур одинаковые ( $E_w = -2.04 \cdot 10^6$  В/см,  $E_b = 1.20 \cdot 10^6$  В/см), но профили потенциала разные. В случае, когда левый барьер является более толстым, внутренние поля за счет эффективного поднятия дна ямы приводят к "голубому" сдвигу первого и второго резонансных пиков. В обратном случае растет "красный" сдвиг первого резонанса и уменьшается энергия второго резонанса, кроме того, вследствие выравнивания "мощностей" двух барьеров (левый барьер становится более высоким, а правый - более низким) вероятность тунелирования в резонансе близка к единице, как для симметричной структуры. Времена прохождения электронов в области нижнего резонанса во всех структурах меньше 1 пс, т.е. имеют тот же порядок, как и в структурах GaAs/AlAs.

Рассмотрено тунелирование электронов через ограниченную сверхрешетку  $(\text{GaN})_4(\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{N})_5$  со спейсер слоем из того же твердого раствора, расположенным слева и толщиной в одну постоянную решетки ( $c$ ). В отсутствии полей за счет "взаимодействия" между состояниями из отдельных ям возникают две неперекрывающиеся по энергии "минизоны", связанные с двумя уровнями в яме. Состояниям таких "минизон" соответствуют резонансные пики в коэффициенте прохождения, рассчитанного без учета полей. Из положений пиков получаются значения разности между энергиями крайних резонансных состояний нижней "минизоны"  $\Delta E = 0.037$  эВ и щели между соседними состояниями в "минизоне"  $\Delta E/n = 0.009$  эВ ( $n=4$ ). При учете внутренних полей напряженности в слоях равны  $E_w = -1.60 \cdot 10^6$  В/см,  $E_b = 1.64 \cdot 10^6$  В/см. Справа от спейсер слоя потенциал сверхрешетки выглядит так, как если бы она находилась в однородном



внешнем поле с напряженностью  $E_{\text{eff}} = -2.3 \cdot 10^5$  В/см, величина которой определяется из отношения сдвига потенциала  $\Delta V = 0.084$  эВ к периоду сверхрешетки. Поскольку значение  $\Delta E$  близко к ширине минизоны бесконечной сверхрешетки, то его можно использовать для проверки выполнимости критерия формирования штарковской лестницы ( $\Delta V \gg \Delta E/n$ ), означающего разрушение электрическим полем  $E_{\text{eff}}$  сверхрешеточной гибридизации состояний из отдельных ям. Для нижней минизоны данный критерий выполняется достаточно хорошо, присутствуют все основные признаки штарковской лестницы состояний этой минизоны (локализация зарядовой плотности в отдельных ямах, эквидистантный шаг между резонансными уровнями, совпадающий с величиной скачка потенциала  $\Delta V$ ). При энергиях  $E > 0.6$  эВ более размытым пикам в  $P(E)$  отвечают резонансные состояния второй минизоны. Для них критерий выполняется не достаточно строго ( $n\Delta V/\Delta E \sim 2$ ) и выраженная локализация зарядовой плотности в ямах отсутствует.

Таким образом, возникновение штарковской лестницы за счет внутренних полей в ограниченных нитридных сверхрешетках зависит от величины напряженности поля  $E_{\text{eff}}$  и дисперсии минизоны. Выполнимость условий ее наблюдения можно обеспечить подходящим выбором размеров и составов слоев сверхрешетки. Типичное значение необходимой для этого напряженности поля  $E_{\text{eff}}$  составляет  $\sim 10^5$  В/см, как и в случае с внешними полями.

**В заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы, обсуждается дальнейшее развитие исследований.

### Основные результаты и выводы

- 1) Исследован эффект полного отражения электронной волны от гетерограницы GaAs/AlAs(001). Показано, что появление нуля в коэффициенте прохождения электронов через гетерограницу GaAs/AlAs(001), обнаруживаемое в интервале энергии от дна  $X$ -долины AlAs до дна двугорбой структуры GaAs, обусловлено взаимной компенсацией вкладов от „виртуальных процессов" с участием  $\Gamma$ ,  $X_1$  и  $X_3$  состояний. Появление нуля в коэффициенте прохождения не связано с каким-либо интерфейсным резонансным состоянием, а является следствием многодолинного характера зонного спектра GaAs, AlAs.
- 2) Показано, что энергии и симметрия состояний глубоких уровней вакансий Al, Ga и As в сверхрешетке  $(\text{GaAs})_3(\text{AlAs})_1(001)$  зависят от положения дефектов в решетке. Понижение симметрии по сравнению с бинарными кристаллами приводит к частичному (полному) снятию вырождения глубоких уровней вакансий, находящихся в средних (крайних) по отношению к Al слоях, а также к различной ориентации их зарядовых плотностей. Наибольшие изменения ( $\sim 0.1$  эВ) имеют место для вакансии As, расположенной непосредственно на гетерогранице.
- 3) Исследовано туннелирование электронов через напряженные, вюрцитные структуры GaN/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>N(0001). Показано, что при небольшой концентрации алюминия ( $x < 0.3$ ) результаты многозонных расчетов удовлетворительно описываются однодолинной моделью метода огибающей волновой функции при учете зависимости эффективной массы от энергии и деформации. Внутренние электрические поля, связанные со спонтанной и пьезоэлектрической поляризацией, приводят к красному или голубому сдвигу резонансных энергий в зависимости от толщины и расположения барьеров по отношению к полярной оси. В сверхрешетках  $(\text{GaN})_n(\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{N})_m$  внутренние поля могут формировать штарковскую лестницу электронных состояний при небольшом числе ультратонких слоев даже в отсутствии внешнего поля.
- 4) Исследованы электронные состояния арсенида галлия с мышьяковыми кластерами тетраэдрической симметрии. Показано, что локализованные состояния в окрестности запрещенной зоны можно интерпретировать как результат расщепления за счет взаимодействия с окружением совокупности уровней  $A_1$ , образованных в запрещенной

зоне не взаимодействующими антиструктурными дефектами  $As_{Ga}$ , входящими в кластер. Малые мышьяковые кластеры выступают донорами.

5) Изучены электронные состояния, создаваемые кластерами и тонкими слоями из атомов галлия  $GaAs$ . Показано, что запрещенная зона  $GaAs$  плотно заполняется локализованными состояниями с ростом размеров кластеров  $Ga$ . Одновременно с этим уровень Ферми быстро достигает своего предельного значения, близкого к величине барьера Шоттки для плоской границы металл/полупроводник. Положение по энергии и "хвосты" состояний в области уровня Ферми определяются интерфейсными слоями из антиструктурных дефектов  $Ga_{As}$ . Эти состояния одновременно выступают и как щелевые металл-индуцированные состояния и как "перенормированные" за счет взаимодействия состояния глубоких уровней одиночных дефектов  $Ga_{As}$ , что свидетельствует о тесной взаимосвязи моделей, основанных на представлениях о закреплении уровня Ферми дефектными и металл-индуцированными состояниями.

6) Изучены электронные состояния и спектры оптического поглощения германиевых кластеров в кремнии. Показано, что с ростом размеров германиевых кластеров дырочный уровень размерного квантования монотонно смещается вглубь запрещенной зоны  $Si$ , что приводит к красному сдвигу края оптического поглощения. Наиболее интенсивное поглощение связано с переходами с резонансного интерфейсного состояния на дно зоны проводимости кремниевой матрицы. Волновая функция локализованного, дырочного состояния обнаруживает характер, свойственный однодолинному приближению метода эффективной массы. В модели с резко оборванным на гетерогранице кластер/матрица потенциалом этот метод дает результаты, близкие к псевдопотенциальному расчету для кластеров с размерами, большими  $\sim 2$  нм.

7) Исследованы электронные состояния и оптические свойства периодического массива пирамидальных квантовых точек  $w-GaN/AlN(0001)$ . Показано, что вследствие эффектов размерного квантования минимум нижней электронной минизоны массива точек происходит из состояния квантовой  $\Gamma$  ямы, а выше лежащие уровни связаны с состояниями боковых  $U$  долин и окрестности  $\Gamma$  долины зоны проводимости бинарных кристаллов. Наиболее интенсивное поглощение света отвечает волнам, поляризованным в базальной плоскости  $E \perp c$ , и связано с электронными переходами  $\Gamma_1 \rightarrow \Gamma_3$  с нижнего уровня  $\Gamma_1$  на два близких уровня  $\Gamma_3$ , возникающих в результате смешивания состояний из  $U$  долин и линии  $\Sigma$ . Поглощение света с поляризацией  $E \parallel c$  более слабое, пик сдвинут в сторону больших энергий и обусловлен переходом с нижнего уровня на возбужденный уровень, происходящий из состояний с линии  $\Delta$ . Благодаря увеличению облучаемой поверхности при фронтальном падении света, массивы малых квантовых точек  $GaN$  ( $\sim 2$  нм диаметр основания пирамиды,  $\sim 1$  нм высота пирамиды) могут быть использованы для повышения эффективности инфракрасных фотоприемников.

8) Исследовано влияние плавного интерфейсного потенциала на электронные состояния в гетероструктурах  $GaAs/AlAs$  с использованием представления переходной области на гетерограницах фрагментами ультратонких сверхрешеток  $(GaAs)_n(AlAs)_m(001)$ . В такой модели междолинное смешивание происходит на двух границах и в области переходного слоя. Учет плавного потенциала приводит к заметным изменениям при туннелировании электронов в структурах с тонкими слоями, причем особенно существенным в том случае, когда они происходят при участии коротковолновых состояний в области междолинного смешивания.

9) Развита двухдолинная  $\Gamma-L$  модель электронных состояний в структурах  $GaAs/AlAs(111)$  с резко оборванным на границе потенциалом. Обнаружены "интерфейсные" состояния, имеющие максимальную электронную плотность на гетерограницах  $GaAs(111B)/AlAs(111A)$ . Эти состояния быстро распадаются за счет сильного  $\Gamma-L$  взаимодействия на границе, когда слой  $GaAs$  не ограничен слоями  $AlAs$  с обеих сторон.

10) Установлена корреляция в положении глубоких уровней собственных точечных дефектов с предельным положением уровня Ферми в облученных полупроводниках группы III-V. Предложена теоретическая модель наиболее локализованного дефектного состояния кристалла, позволяющая определять положение уровня Ферми в радиационно-модифицированных полупроводниках, высоту барьера Шоттки и разрывы зон в полупроводниковых гетероструктурах.

11) Показано, что за счет эффектов размерного квантования в зоне проводимости ультрагонких сверхрешеток  $(\text{GaAs})_n(\text{AlAs})_m(001)$  возникают близко расположенные конкурирующие долины, волновые функции которых локализованы в соответствующих квантовых ямах. Это приводит к росту интенсивности междолинных переходов в сверхрешетках по сравнению с аналогичными переходами в твердых растворах. Наиболее сильная локализация волновых функций имеет место в глубоких  $\Gamma$  ямах GaAs, что вызывает немонотонное изменение деформационных потенциалов переходов типа  $\Gamma$ -X и  $\Gamma$ -L в ряду сверхрешеток. Междолинные переходы электронов в зоне проводимости сверхрешеток  $\Gamma_1$ -M<sub>5</sub>,  $\Gamma_1$ -X<sub>1</sub>,  $\Gamma_1$ -X<sub>3</sub>, X<sub>1</sub>-X<sub>1</sub>, X<sub>1</sub>-X<sub>3</sub>,  $\Gamma_3$ -M<sub>5</sub> происходят в основном за счет колебаний катионов, переходы X<sub>1</sub>-M<sub>5</sub>, X<sub>3</sub>-M<sub>5</sub>,  $\Gamma_3$ -X<sub>1</sub>,  $\Gamma_3$ -X<sub>3</sub> – за счет колебаний анионов, а наиболее интенсивные каналы рассеяния  $\Gamma_3$ -M<sub>5</sub> и Z<sub>3</sub>-M<sub>5</sub> связаны с оптическими колебаниями легких атомов Al. Усредненные по каналам рассеяния деформационные потенциалы в сверхрешетках больше, чем в соответствующих твердых растворах.

### Цитируемая литература:

1. Rossi F. Theory of Semiconductor Quantum Devices Microscopic Modeling and Simulation Strategies. - Berlin, Springer Verlag, 2011. - 380 P.
2. Yu, M. Local-basis quasiparticle calculations and the dielectric response function of Si clusters / M.Yu, S.E.Ulloa, D.A.Drabold // Phys.Rev.B.- 2000.- V.61. – P. 2626-2631.
3. Mader, K.A. Empirical atomic pseudopotentials for AlAs/GaAs superlattices, alloys, and nanostructures / K.A.Mader, A.Zunger // Phys.Rev.B.- 1994.-V.50.- P.17393-17405.
4. Мильвидский, М.Г. Наноразмерные атомные кластеры в полупроводниках – новый подход к формированию свойств материалов / М.Г.Мильвидский, В.В. Чалдышев // Физика и техника полупроводников. – 1998. - Т.32. – С.513-522.
5. Никифоров, А.И. Получение наноструктур Ge ультрамалых размеров с высокой плотностью на атомарно-чистой поверхности окиси Si / А.И.Никифоров, В.В.Ульянов, О.П.Пчеляков, С.А.Тийс, А.К.Гутаковский //Физика твердого тела. – 2005. – Т.47. – С.67-69.
6. Горюнова Н.А., Валов Ю.А. (Ред.), Полупроводники  $\text{A}^2\text{B}^4\text{C}_5$ . - М., Советское радио.- 1974.- 374 С.
7. Shay J.L. and Wernick J.H. Chalcopyrite Semiconductors: Growth, Electronic Properties, and Applications. – Oxford, Pergamon Press, 1975. - 330 P.
8. Bachelet, G.B. Pseudopotentials that work: from H to Pu / G.B. Bachelet, M. Schlüter, D.R. Hamann // Phys. Rev. B.- 1982.- V.26.- P. 4199-4228.
9. Чалдышев, В.А. Расчет электронного спектра соединений  $\text{A}_3\text{B}_5$  и твердых растворов на их основе методом модельного псевдопотенциала / В.А.Чалдышев, С.Н. Гриняев // Известия вузов. Физика. -1983. - Т.26, №3. - С.38-61.
10. Limpijumngong, S. Electronic structure of  $\text{ZnGeP}_2$ : A detailed study of the band structure near the fundamental gap and its associated parameters / S.Limpijumngong, W.R.L.Lambrecht, B.Segall // Phys.Rev.B. -1999.- V.60.- P.8087–8096.
11. Басалаев, Ю.М. Оптические свойства кристаллов  $\text{ZnGeP}_2$  в ультрафиолетовой области / Ю.М.Басалаев, А.Б.Гордиенко, А.С.Поплавной // Физика и техника полупроводников.- 2005.- Т.39, - С.1040-1042.
12. Varea de Alvarez, C. Calculated and measured reflectivity of  $\text{ZnGeP}_2$  / C.Varea de Alvarez, M.L.Cohen, S.E.Kohn, Y.Petroff, Y.R.Shen // Phys. Rev.B. -1974.- V.10.- P.5175-5183.

13. Fujimoto, H. Direct and indirect transition in  $(\text{GaAs})_n/(\text{AlAs})_n$  superlattices with  $n=1-15$  / H.Fujimoto, C.Hamaguchi, T.Nakazawa, K.Taniguchi, K.Imanishi, H.Kato, Y.Watanabe // *Phys.Rev.B.* - 1990. - V.41.-P.7593-7601.
14. Zapol, P. Atomic calculation of defects in  $\text{ZnGeP}_2$  / P.Zapol, R.Pandey, M.Ohmer, J.Gale // *J. Appl. Phys.* - 1996. - V.79.- P.671-675.
15. Jiang, X. Theoretical study of cation-related point defects in  $\text{ZnGeP}_2$  // X.Jiang, M.S.Miao, W.R.L. Lambrecht // *Phys.Rev.B.* - 2005. - V.71. - P.205212-1-205212-12.
16. Giles, N.C. Photoinduced electron paramagnetic resonance of the phosphorus vacancy in  $\text{ZnGeP}_2$  / N.C.Giles, L.E.Halliburton, P.G.Schunemann, T.M.Pollak // *Appl. Phys.Lett.* - 1995.- V. 66.- P.1758-1760.
17. Giles, N.C. Infrared absorption bands associated with native defects in  $\text{ZnGeP}_2$  / N.C.Giles, Lihua Bai, M.M.Chirila, N.Y.Garces, K.T.Stevens, P.G.Schunemann, S.D.Setzler, T.M.Pollak // *J.Appl.Phys.*-2003.- V.93.- P.8975-8981.
18. Flores, F. On the formation of semiconductor interfaces / F.Flores, C.Tejedor // *J.Phys.C.*- 1987.- V.20.- P.145-176.
19. Andreev, A.D. Theory of the electronic structure of  $\text{GaN}/\text{AlN}$  hexagonal quantum dots / A.D. Andreev, E.P. O'Reilly // *Phys. Rev.B.*- 2000. - V.62.- P.15851-15870.
20. Bagga, A. Energy levels of nitride quantum dots: Wurtzite versus zinc-blende structure / A.Bagga, P.K.Chattopadhyay, S.Glosh // *Phys.Rev.B.* - 2003. - V.68. - P.155331-1-155331-10.
21. Spicer, W.E. New and unified model for Schottky barrier and III-V insulator interface states Formation / W.E.Spicer, P.W.Chye, P.R.Skeatch, C.Y.Su, L.Lindau // *J. Vac. Sci. Technol.* - 1979.- V.16.- P.1422-1433.
22. Tersoff, J. Summary Abstract: Failure of the common anion rule for lattice-matched Heterojunctions / J. Tersoff // *J.Vac. Sci. Technol.B.*-1986.- V.4.- P.1066-1067.
23. Cardona, M. Acoustic deformation potentials and heterostructure band offsets in semiconductors / M.Cardona, N.Christensen // *Phys.Rev.B.*- 1987. - V.35.- P.6182-6194.
24. Walukiewicz, W. Mechanism of Fermi-level stabilization in semiconductors / W.Walukiewicz // *Phys.Rev.B.* - 1988. - V.37. - P.4760-4763.
25. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. - М., ГИФМЛ. - 1963. - 704 С.
26. Бу Т.Ю., Омура Т. Квантовая теория рассеяния. - М., Наука. - 1969. - 452 С.

#### **Список основных публикаций по теме диссертации**

1. Чалдышев, В.А. Расчет электронного спектра соединений  $\text{A}_3\text{B}_5$  и твердых растворов на их основе методом модельного псевдопотенциала / В.А.Чалдышев, С.Н. Гриняев // *Известия вузов. Физика* -1983. - Т.26, №3. - С.38-61.
2. Гриняев, С.Н. Переносимый модельный псевдопотенциал: расчет спектров изолированных ионов / С.Н.Гриняев, С.Г.Катаев, А.В.Нявро, В.А.Чалдышев // *Известия вузов. Физика* - 1985. - Т.28, №8. - С.122-124.
3. Гриняев, С.Н. Псевдопотенциальный расчет междолинных потенциалов рассеяния / С.Н.Гриняев, Г.Ф.Караваев, В.Г.Тютюрев, В.А.Чалдышев // *Физика твердого тела* - 1988.- Т.30, №9. - С.2753-2756.
4. Гриняев, С.Н. Расчет параметров междолинного рассеяния на фононах в полупроводниковых кристаллах  $\text{A}_3\text{B}_5$  / С.Н.Гриняев, Г.Ф.Караваев, В.Г.Тютюрев // *Физика и техника полупроводников* - 1989. - Т.23, №8. - С.1458-1461.
5. Гриняев, С.Н. Электронная структура графитоподобного и ромбоэдрического нитрида бора / С.Н.Гриняев, В.В.Лопатин // *Известия вузов. Физика* - 1992. - Т.35, №2. - С.27-32.
6. Гриняев, С.Н. Рассеяние электронов в многобарьерных структурах  $\text{GaAs}/\text{Al}(x)\text{Ga}(1-x)\text{As}$  / С.Н.Гриняев, В.Н.Чернышов // *Физика и техника полупроводников* - 1992. - Т.26, №12. - С.2057-2067.

7. Brudnyi, V.N. Local neutrality conception: Fermi level pinning in defective semiconductors / V.N.Brudnyi, S.N.Grinyaev, V.E.Stepanov // *Physica B:Cond.Matter.* – 1995. - V.212. - P.429-435.
8. Grinyaev, S.N. Intervalley deformation potentials in  $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_1$  superlattice / S.N.Grinyaev, G.F.Karavaev, V.G.Tyuterev // *Physica B:Cond.Matter.* – 1996. - V.228, N3-4. - P.319-328.
9. Гриняев, С.Н. Исследование глубоких уровней антиструктурных дефектов  $\text{As}_{\text{Ga}}$ ,  $\text{Ga}_{\text{As}}$  и гетероантиструктурных дефектов  $\text{In}_{\text{As}}$ ,  $\text{Sb}_{\text{Ga}}$  в GaAs методом расширенной элементарной ячейки  $4 \times 4 \times 4$  / С.Н.Гриняев, В.А.Чалдышев // *Известия вузов. Физика* - 1996. - Т.39, №8. - С.13-21.
10. Гриняев, С.Н. Расчет электронного энергетического спектра арсенида галлия с мышьяковыми кластерами / С.Н.Гриняев, В.А.Чалдышев // *Физика и техника полупроводников* – 1996. - Т.30, №12. - С.2195-2202.
11. Гриняев, С.Н. Распределение валентного заряда и уровень электронной нейтральности в графитоподобном и ромбоэдрическом нитриде бора / С.Н.Гриняев, В.В.Лопатин // *Физика твердого тела* – 1996. - Т.38, №12. - С.3576-3584.
12. Гриняев, С.Н. Глубокие уровни вакансий в сверхрешетке  $(\text{AlAs})_1(\text{GaAs})_3$  / С.Н.Гриняев, Г.Ф.Караваев // *Физика и техника полупроводников* – 1997. - Т.31, №5. - С.545-555.
13. Гриняев, С.Н. Анизотропия химической связи и электронной структуры в графитоподобном и ромбоэдрическом нитриде бора / С.Н.Гриняев, В.В.Лопатин // *Журнал структурной физики* – 1997. - Т.38, №1. - С.32-41.
14. Гриняев, С.Н. Локализованные состояния вблизи запрещенной зоны GaAs, вызванные тетраэдрическими мышьяковыми кластерами / С.Н.Гриняев, В.А.Чалдышев // *Физика и техника полупроводников* – 1998. - Т.32, №9. - С.1094-1099.
15. Брудный, В.Н. Физика сложных полупроводниковых кристаллов и структур / В.Н.Брудный, О.В.Воеводина, В.Г.Воеводин, С.Н.Гриняев, И.В.Ивонин, Г.Ф.Караваев, Л.Г.Лаврентьева // *Известия вузов. Физика* – 1998. - Т.41, №8. - С.26-38.
16. Гриняев, С.Н. Резонансное туннелирование электронов в структурах GaAs/AlAs(111) / С.Н.Гриняев, Г.Ф.Караваев // *Известия вузов. Физика* - 1998. - Т.41, №9. - С.89-99.
17. Брудный, В.Н. Локальная электронной нейтральность и закрепление химического потенциала в твердых растворах соединений III-V: границы раздела, радиационные дефекты / В.Н.Брудный, С.Н.Гриняев // *Физика и техника полупроводников* - 1998. - Т.32, №3. - С.315-318.
18. Гриняев, С.Н. Туннелирование электронов через тонкий барьер с плавным потенциалом на гетерограницах GaAs/AlAs(001) / С.Н.Гриняев, Г.Ф.Караваев // *Физика твердого тела* - 2000. - Т.42, №4. - С.752-758.
19. Гриняев, С.Н. Глубокие уровни кластеров из атомов галлия в GaAs / С.Н.Гриняев, В.А.Чалдышев // *Физика и техника полупроводников* – 2001. - Т.35, №1. - С.84-88.
20. Гриняев, С.Н. Резонансное туннелирование электронов в напряженных структурах GaN/Ga(1-x)Al(x)N(0001) с учетом спонтанной поляризации и пьезоэффекта / С.Н.Гриняев, А.Н.Разжувалов // *Физика твердого тела* – 2001. - Т.43, №3. - С.529-535.
21. Voevodin, V.G. Deep levels of antisite defects clusters in ZnGeP<sub>2</sub> / V.G.Voevodin, S.N.Grinyaev // *Material Research Society Symposium Proceedings* – 2001. - V.677. - P.AA4.6.1- AA4.6.6.
22. Гриняев, С.Н. Глубокие уровни комплексов вакансий азота в графитоподобном нитриде бора / С.Н.Гриняев, Ф.В.Конусов, В.В.Лопатин // *Физика твердого тела* – 2002. - Т.44, №2. - С.275-282.
23. Брудный, В.Н. Электронные свойства облученных полупроводников, модель закрепления уровня Ферми / В.Н.Брудный, С.Н.Гриняев, Н.Г.Колин // *Физика и техника полупроводников* – 2003. - Т.37, №5. - С.557-564.

24. Voevodin, V.G. Nonstoichiometry and point defects in nonlinear optical crystals  $A^2B^4C_5^2$  / V.G.Voevodin, S.N.Grinyaev, O.V.Voevodina // Materials Science in Semiconductor Processing - 2003. - V.6, N5-6. - P.385-388.
25. Гриняев, С.Н. Особенности рассеяния электронов на гетерограницах  $Al_xGa_{1-x}As/AlAs(001)$  / С.Н.Гриняев, Г.Ф.Караваев, В.Н.Чернышов // Физика и техника полупроводников - 2003. - Т.37, №4. - С.435-442.
26. Гриняев, С.Н. Влияние внутренних полей на туннельный ток в напряженных структурах  $GaN/Al_xGa_{1-x}N(0001)$  / С.Н.Гриняев, А.Н.Разжувалов // Физика и техника полупроводников - 2003. - Т.37, №4. - С.450-455.
27. Брудный, В.Н. Модель межфазных границ для полупроводниковых систем: численные оценки / В.Н.Брудный, С.Н.Гриняев, Н.Г.Колин // Материаловедение - 2003. - Т.72, №3. - С.17-25.
28. Брудный, В.Н. Закрепление уровня Ферми в полупроводниках (границы раздела, кластеры, радиационное модифицирование) / В.Н.Брудный, С.Н.Гриняев, Н.Г.Колин // Известия вузов. Физика - 2003. - Т.46, №6. - С.59-66.
29. Гриняев, С.Н. Оптическое поглощение гексагонального нитрида бора с участием вакансий азота и их комплексов / С.Н.Гриняев, Ф.В.Конусов, В.В.Лопатин, Л.Н.Шиян // Физика твердого тела - 2004. - Т.46, №3. - С.424-429.
30. Брудный, В.Н. Кремний-германиевые наноструктуры: электронные параметры и оптические характеристики / В.Н.Брудный, С.Н.Гриняев // Известия вузов. Физика - 2004. - Т.47, №6. - С.3-7.
31. Brudnyi, V.N. A model for Fermi-level pinning in semiconductors: radiation defects, interface boundaries / V.N.Brudnyi, S.N.Grinyaev, N.G.Kolin // Physica B - 2004. - V.348. - P.213-225.
32. Брудный, В.Н. Электрофизические и оптические свойства  $InAs$ , облученного электронами ( $\sim 2$  МэВ): энергетическая структура собственных точечных дефектов / В.Н.Брудный, С.Н.Гриняев, Н.Г.Колин // Физика и техника полупроводников - 2005. - Т.39, №4. - С.409-418.
33. Брудный, В.Н. Электронные свойства кремния с германиевыми кластерами ультрамалых размеров / В.Н.Брудный, С.Н.Гриняев, А.В.Двуреченский // Физика твердого тела - 2005. - Т.47, №11. - С.1941-1945.
34. Гриняев, С.Н. Междолинное рассеяние электронов на фононах в ультратонких сверхрешетках  $(AlAs)_1(GaAs)_3$  / Л.Н.Никитина, В.Г.Тютерев // Физика твердого тела - 2006. - Т.48, №1. - С. 120-127.
35. Караваев, Г.Ф. "Сверхрешеточная" модель плавной гетерограницы  $(GaAs)/(AlAs)(001)$  / Г.Ф.Караваев, С.Н.Гриняев // Физика твердого тела - 2006. - Т.48, №5. - С.893-901.
36. Брудный, В.Н. Глубокие уровни собственных точечных дефектов и природа "аномального" оптического поглощения в  $ZnGeP_2$  / В.Н.Брудный, В.Г.Воеводин, С.Н.Гриняев // Физика твердого тела - 2006. - Т.48, №11. - С.1949-1961.
37. Брудный, В.Н. Уровень зарядовой электронной нейтральности в твердых растворах  $w-Al(x)Ga(1-x)N$  / В.Н.Брудный, С.Н.Гриняев, Н.Г.Колин // Известия вузов. Физика - 2006. - Т.49, №8. - С.75-78.
38. Брудный, В.Н. Корреляция положения глубоких уровней собственных точечных дефектов с «предельным» положением уровня Ферми в облученных полупроводниках группы III-V / В.Н.Брудный, С.Н.Гриняев, Н.Г.Колин // Известия вузов. Физика - 2007. - Т.50, №5. - С.17-22.
39. Гриняев, С.Н. Туннелирование электронов в структурах  $GaAs/AlAs(111)$  с плавным потенциалом на гетерограницах / С.Н.Гриняев, Г.Ф.Караваев // Известия вузов. Физика - 2007. - Т.50, №7. - С.7-13.
40. Караваев, Г.Ф. Модели рассеяния электронов на гетерогранице  $GaAs/AlAs(001)$  / Г.Ф.Караваев, С.Н.Гриняев // Известия вузов. Физика - 2007. - Т.50, №10. - С.34-43.

41. Tronc, P. Optical properties of photodetectors based on wurtzite quantum dot arrays / P.Tronc, K.S.Zhuravlev, V.G.Mansurov, G.F.Karavaev, S.N.Grinyaev, I.Milosevic, M.Damnjanovic // *Phys.Rev. B* – 2008. -V.77, N16. - P.165328(7).
42. Журавлев, К.С. Материалы для фотоприемников на межподзонных переходах в GaN/AlGaN - квантовых точках / К.С.Журавлев, В.Г.Мансуров, С.Н.Гриняев, Г.Ф.Караваев, П.Тронк // *Оптический журнал* – 2009. - Т.76, № 12. - С.74-83.
43. Караваев, Г.Ф. Изучение спектра сверхрешеток GaAs/AlAs в рамках моделей с резкой и плавной границами / Г.Ф.Караваев, С.Н.Гриняев // *Известия вузов. Физика* - 2010. - Т.53, №1. - С.45-54.
44. Брудный, В.Н. Генезис дырочных состояний малых германиевых кластеров в кремнии / В.Н.Брудный, С.Н.Гриняев // *Известия вузов. Физика* – 2010. - Т.53, №5. - С.68-73.
45. Брудный, В.Н. Спектры оптического поглощения Si с квантовыми точками Ge / В.Н.Брудный, С.Н.Гриняев // *Известия вузов. Физика* – 2010. - Т.53, №7. - С.43-45.
46. Гриняев, С.Н. Междолинное рассеяние электронов на фононах в ультратонких сверхрешетках  $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$  / С.Н.Гриняев, Л.Н.Никитина, В.Г.Тютюрев // *Физика твердого тела* - 2010. - Т.52, №8. - С.1498-1504.
47. Grinyaev, S.N. Intervalley Electron-Phonon Scattering in Ultra-Thin  $(\text{GaAs})_m(\text{AlAs})_n(001)$  Superlattices / S.N.Grinyaev, L.N.Nikitina, V.G.Tuyterev // *Advances in Materials Science Research. Nova Publishers* - 2011. -V.2, Chapter 9. - P.155-176.





Подписано к печати 19.08.2011. Формат 60х84/16. Бумага «Снегурочка».  
Печать XEROX. Усл.печ.л. 2,79. Уч.-изд.л. 2,52.  
Заказ 1254-11 Тираж 100 экз.



Томский политехнический университет  
Система менеджмента качества  
Томского политехнического университета сертифицирована  
NATIONAL QUALITY ASSURANCE по стандарту ISO 9001:2008



ИЗДАТЕЛЬСТВО



ТПУ, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30  
Тел./факс: 8(3822)56-35-35, [www.tpu.ru](http://www.tpu.ru)



